



UNIVERSIDAD CENTRAL DE VENEZUELA
FACULTAD DE CIENCIAS
POSTGRADO EN MATEMÁTICA

**INFERENCIA NO PARAMÉTRICA SOBRE PROCESOS ESTOCÁSTICOS
HAMILTONIANOS Y ANÁLISIS DEL TRASPORTE DE CONTAMINANTES EN
CUERPOS DE AGUA**

**Autor: Angie Pineda.
Tutor: José Rafael León.**

Tesis Doctoral presentada ante la ilustre
Universidad Central de Venezuela
para optar al título de
Doctor en Ciencias
Mención Matemática

Caracas, Venezuela
14/03/2017



VEREDICTO

Quienes suscriben, miembros del jurado designado por el Consejo de la Facultad de Ciencias y el Consejo de Estudios de Postgrado de la Universidad Central de Venezuela, para examinar la **TESIS DOCTORAL** presentada por la estudiante **MAGISTER ANGIE PINEDA CENTENO**, CI.V-15.368.508, bajo el título: **"Inferencia no paramétrica sobre procesos estocásticos hamiltonianos y análisis del transporte de contaminantes en cuerpos de agua"**, a fin de cumplir con el requisito legal para optar al grado académico de **DOCTOR EN CIENCIAS, MENCIÓN MATEMÁTICA**, dejan constancia de lo siguiente:

1.- Leído como fue dicho trabajo por cada uno de los miembros del jurado, se fijó el día **Martes, 13 de Junio de 2017**, a las **2:00 pm**, para que la autora lo defendiera en forma pública, lo que ésta hizo en la **Sala Raimundo Chela de la Escuela de Matemática, Facultad de Ciencias, Universidad Central de Venezuela**, mediante un resumen oral de su contenido, luego de lo cual respondió satisfactoriamente a las preguntas que le fueron formuladas por el jurado, todo ello conforme con lo dispuesto en el Reglamento de Estudios de Postgrado.

2.- El jurado decidió **APROBARLO**, sin hacerse solidario con la ideas expuestas por la autora, porque se ajusta a lo dispuesto y exigido en el Reglamento de Estudios de Postgrado.

Para dar este Veredicto, el jurado estimó que el trabajo examinado reúne los requisitos de presentación, originalidad, revisión bibliográfica e impacto necesarios para constituir una Tesis Doctoral. Constituyendo un aporte importante en la simulación, solución y estimación de ecuaciones diferenciales estocásticas. Mostrando además dos ejemplos de aplicación de sus métodos a los sistemas Hamiltonianos Estocásticos y al transporte de contaminantes en el Lago de Valencia.

3.- El jurado por unanimidad decidió otorgar la calificación de **EXCELENTE** al presente trabajo por considerar que presenta contribuciones valiosas a los temas abordados que se sustentan por opiniones de investigadores reconocidos en el área.

En fe de lo cual se levanta la presente ACTA, a los **13 días** del mes de **Junio** del año **2017**, conforme a lo dispuesto en el Reglamento de Estudios de Postgrado. Actuó como Coordinador del Jurado el **Dr. JOSÉ RAFAEL LEÓN (UCV)**.

DRA. ELVIA FLORES (UCV)
CI.V-4.128.598

Jurado designado por Consejo Facultad

DR. DANIEL BARRÁEZ (UCV)
CI.V-6.197.305

Jurado designado por Consejo de Facultad

DR. JOSÉ MARCANO-(UC)
C.I.V-8.254.206

Jurado designado por Consejo de Estudios de Postgrado

DR. JUAN GUEVARA-(UCV)
C.I.V-6.006.521

Jurado designado por Consejo de Estudios de Postgrado

DR. JOSÉ RAFAEL LEÓN-(UCV)
CI.V-3.846.337
Tutor



Resumen

En este trabajo de tesis se estudian dos problemas de estimación: ajuste de modelos matemáticos a datos de dinámicas moleculares y descargas neuronales, y generación de métodos de aproximación para la simulación del transporte de desechos orgánicos en cuerpos de agua cerrados y poco profundos.

Para resolver el primer problema, se definen estimadores no paramétricos de la densidad de la solución y los coeficientes de sistemas hipoeĺpticos de ecuaciones diferenciales estocásticas (*EDEs*), usados para modelar los datos de interés. La aproximación de estos elementos permite: 1) definir explícitamente un sistema de *EDEs* que explica el comportamiento de los datos, y 2) dar respuesta a otro tipo de incógnitas, como por ejemplo predicciones asociadas al evento de donde provienen los datos. Los sistemas hipoeĺpticos considerados para modelar este tipo de datos están caracterizados por una relación de generación y disipación de energía entre su drift y su coeficiente de difusión. Esta relación de fluctuación-disipación, implica la simplificación de hipótesis que garantizan la convergencia de los estimadores a los parámetros de la *EDE* que estiman.

Con el objetivo de analizar la bondad de los estimadores propuestos se realizan experimentos numéricos con cuatro sistemas hipoeĺpticos de *EDEs*. Por cada sistema se aproxima una realización, para evaluar los estimadores y comparar estos resultados con los coeficientes del sistema hipoeĺptico del que se generó la realización. También se realizan pruebas correspondientes al error de estimación: cálculo del error cuadrático medio integrado relativo de cada estimador, y tasa de convergencia del método que define el algoritmo, con el que se generan las muestras de las trayectorias del sistema en estudio .

Con respecto al segundo problema de estimación, se consideran los modelos estocásticos paseo aleatorio y vuelo aleatorio, complementados con las condiciones de borde de Newmann correspondientes al caso estocástico, para simular el desplazamiento de desechos orgánicos en el agua: movidos por la corriente del agua (aproximada con las ecuaciones de Saint-Venant) y las colisiones de las partículas del contaminante con las moléculas propias del agua (aproximadas con variables aleatorias y datos experimentales). Como una aplicación, se implementan los modelos estocásticos para simular la dispersión real de desechos orgánicos en el Lago de Valencia durante un período de tiempo específico. Para llevar a cabo estas implementaciones, se considera como condición inicial de los modelos una distribución que simula la clorofila en el Lago de Valencia en un instante de tiempo específico, concebido como el instante inicial de observación de la dispersión del contaminante en el lago. Se asume la presencia de clorofila en el lago como indicador de la presencia del contaminante, basados en el hecho de que los componentes fundamentales de los desechos orgánicos (fósforo y nitrógeno), descargados en cuerpos de agua, son los principales nutrientes de los elementos que contienen clorofila (como las algas).

La presencia de clorofila en el lago se determina a través de su índice de vegetación (*NDVI*), el cual se calcula a partir de sus imágenes satelitales. El procedimiento de aproximación para la condición inicial se ejecuta usando un algoritmo de rebote en el borde que garantiza el rebote simétrico, al interior del lago, de las partículas del contaminante que arriban a la parte exterior de su borde. La condición inicial así fabricada corresponde a una distribución de probabilidad que aproxima con precisión la distribución real de los desechos orgánicos en el lago, correspondiente al instante de tiempo inicial de observación, debido a que no está definida únicamente por la posiciones en donde se observa clorofila, sino también por una medida de la densidad de la clorofila en estas posiciones.

Contenidos

Introducción	8
1. Marco Teórico	11
1.1. Procesos Markovianos continuos.	11
1.1.1. Ergodicidad	14
1.1.2. Difusiones.	17
1.2. Mixing.	24
1.2.1. Procesos α -mixing y β -mixing.	25
2. Difusiones hipoeĺpticas caracterizadas por la condici3n de fluctuaci3n-disipaci3n.	27
2.1. Defini3n del sistema, existencia y unicidad.	27
2.1.1. Existencia y unicidad de la soluci3n del sistema.	28
2.1.2. Condiciones suficientes para la ergodicidad: Existencia y unicidad de una medida invariante.	30
2.2. Pruebas de ergodicidad usando funciones de Lyapunov	32
2.2.1. Difusi3n hipoeĺptica en \mathbb{R}^{2d} bajo una condici3n sobre el drift	32
2.2.2. Part3cula en un potencial peri3dico	35
2.3. Inferencia estadística sobre los parámetros de una difusi3n hipoeĺptica.	35
2.3.1. Estimaci3n de la densidad invariante	37
2.3.2. Estimaci3n del Drift.	42
2.3.3. Estimaci3n de la varianza y del gradiente del potencial	47
3. Experimentos numéricos sobre Procesos Hamiltonianos Amortiguados.	50
3.1. M3todo de aproximaci3n de trayectorias	50
3.2. Simulaci3n de parámetros de un sistema estocástico Hamiltoniano	54
3.2.1. Modelo 1: Coeficiente de difusi3n constante y potencial polin3mico	54
3.2.2. Modelo 2: Coeficiente de difusi3n no constante y potencial polin3mico	61
3.2.3. Modelo 3: Potencial peri3dico y coeficiente de difusi3n constante	65
3.2.4. Modelo 4: Potencial peri3dico peri3do 2π y coeficiente de difusi3n constante	67
4. Simulaci3n de una densidad en un conjunto convexo. Aplicaciones.	71
4.1. Simulaci3n de una densidad en un conjunto $\Theta \subset \mathbb{R}^d$ con frontera en C^2	71
4.1.1. Aproximaci3n numérica: muestras aleatorias de distribuci3n $d\mu(x) = \varphi^2(x)dx$	75
4.2. Distribuci3n de contaminantes en el Lago de Valencia determinada por imágenes satelitales.	75
4.2.1. Simulaci3n de una densidad para la distribuci3n de contaminantes en el lago.	76
4.2.2. Generaci3n de muestras aleatorias.	79
5. Dispersi3n de contaminantes en cuerpos de agua cerrados.	80
5.1. Modelos de aproximaci3n para el desplazamiento del contaminante.	81
5.1.1. Modelo hidrodinámico: Ecuaciones de Saint Venant.	81

5.1.2. Modelo estocástico paseo aleatorio	83
5.1.3. Modelo estocástico: vuelo aleatorio	86
5.2. Simulación de la dispersión de desechos orgánicos en el Lago de Valencia (Venezuela). . .	89
5.2.1. Análisis de los modelos	89
5.2.2. Datos usados en la implementación	89
5.2.3. Implementación de los modelos	90
Conclusiones	94
Índice de Figuras	96
Bibliografía	98

Lista de Símbolos

$\partial\Theta$	frontera de un subconjunto Θ de \mathbb{R}^d .
\mathcal{L}	Generador infinitesimal de una difusión de Ito
\mathbb{E}	denota la esperanza de una función medible.
$\mathbb{L}^\infty(\mu)$	conjunto de funciones esencialmente acotadas.
$\mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$	es la σ -álgebra de Borel en \mathbb{R}^d con la topología euclídea.
$\mathcal{C}_b(\mathbb{R})$	es el conjunto de funciones $h : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ continuas y acotadas.
\mathcal{H}	declaración del espacio de probabilidad sobre el que están definidas los procesos solución de los sistemas de <i>EDE</i> estudiadas (declarada en la sección 1.1)
\mathcal{H}_0	hipótesis sobre los coeficientes de un sistema hipoelíptico de ecuaciones diferenciales (declaradas en la sección 2.1)
$\mathcal{H}_{0,1}^l$	hipótesis sobre los coeficientes de un sistema hipoelíptico de ecuaciones diferenciales (declaradas en la sección 2.1)
$\mathcal{H}_{0,2}^l$	hipótesis sobre los coeficientes de un sistema hipoelíptico de ecuaciones diferenciales (declaradas en la sección 2.1)
\mathcal{H}_1^l	hipótesis sobre los coeficientes de un sistema hipoelíptico de ecuaciones diferenciales (declaradas en la sección 2.1)
$\mu_1 \perp \mu_2$	las medidas μ_1 y μ_2 son mutuamente singulares.
∇	Gradiente de una función escalar
$\nabla_y F$	Gradiente de $F(x, y)$ con respecto a y .
\mathbb{N}	Conjunto de números naturales.
$\bar{\Theta}$	clausura del subconjunto $\Theta \subset \mathbb{R}^d$
\mathbb{R}^+	Números reales no negativos.
$\mathbf{B}_b(\mathbb{R}^d)$	colección de funciones a valores reales, medibles con respecto a $\mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$ y acotadas.
$D_{\mathcal{L}}$	dominio del generador infinitesimal \mathcal{L} con respecto a \mathbb{R}^d
$D_{\mathcal{L}}(z)$	dominio del generador infinitesimal \mathcal{L} con respecto a un z fijo en \mathbb{R}^d .
$M(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^r)$	es el espacio normado de matrices de orden $d \times r$.

$C([0, \infty), \mathbb{R}^d)$	conjunto de funciones continuas de $[0, \infty)$ en \mathbb{R}^d .
$C(\Theta)$	colección de funciones $f : \Theta \rightarrow \mathbb{R}$, continuas.
$C_0^{1,2}(\mathbb{R}^{2d})$	conjunto de funciones $f(x, y)$ tales que $\partial_x^k f$, $k = 0, 1$ y $\partial_y^l f$, $l = 1, 2$ son continuas y tienen soporte compacto.
$C^\infty(\mathbb{R}^d)$	es el espacio de funciones $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ infinitamente diferenciables.
C_0^2	conjunto de funciones con segunda derivada continua y soporte compacto.
$C_b(\mathbb{R}^d)$	conjunto de funciones continuas y acotadas de \mathbb{R}^d en \mathbb{R} .
<i>EDEs</i>	Ecuaciones diferenciales estocásticas
<i>HS</i>	Norma de Hilbert-Schmidt para operadores
I_d	es la $d \times d$ matriz identidad, para $d \in \mathbb{N}$.
$L^1(\mathbb{R}^d, \mu)$	conjunto de funciones de \mathbb{R}^d en \mathbb{R} , integrables con respecto a μ .
<i>MSE</i>	error cuadrático medio.
<i>NC</i>	longitud de correlación de una muestra (ver sección 3.1)
<i>NDVI</i>	índice de vegetación de diferencias normalizado
<i>RC</i>	tasa de convergencia
<i>RMISE</i>	Error cuadrático medio integrado relativo
<i>tr</i>	denota la traza en una matriz
$W_{loc}^{1,1}(\Theta)$	funciones en un espacio de Sobolev, localmente integrables y con primera derivada débil en Θ
$W^{2,\infty}(\Theta)$	espacio de Sobolev de funciones dos veces debilmente diferenciables y esencialmente acotadas en Θ
<i>EDE</i>	Ecuación diferencial estocástica.

Introducción

El modelado de fenómenos reales usando procesos de difusión es un importante y muy activo campo de investigación. Esto se debe a que una gran variedad de fenómenos reales de tipo: social, financiero, ambiental, entre otros, varían con el tiempo y esta variación puede ser intuitivamente explicada en función de una contribución determinística y una aleatoria, donde esta última modela el azar que es un componente ineludible de la realidad. Esta suma de contribuciones coincide con la formulación matemática de las ecuaciones diferenciales estocásticas (*EDEs*), cuya solución son los procesos de difusión.

Entre los eventos de interés que pueden ser modelados por ecuaciones diferenciales estocásticas se encuentran las dinámicas moleculares y neuronales, valoración de portafolios financieros, transporte de fluidos, crecimiento de poblaciones, análisis de señales de audio, etc. Este trabajo de tesis se concentra en problemas de estimación asociados a dinámicas moleculares y neuronales, expuesto en el artículo publicado [9]: **P. Cattiaux, J. R. León, A. Pineda and C. Prieur (2016). *An overlook on statistical inference issues for stochastic damping hamiltonian systems under the fluctuation-dissipation condition*, *Statistics*, Vol. 51, No. 1, pp. 11-29**, y transporte de contaminantes expuesto en el artículo aceptado [50]: **M. Valera-López, A. Pineda, J. R. León (2017). *Application of satellite image to the implementation of two stochastic models for modeling the transport of chlorophyll-a on Lake Valencia (Venezuela)*, *Journal de la Société Française de Statistique (JSFdS)***. Ambos artículos le dan soporte a esta tesis doctoral desarrollándose en ellos la mayor parte de sus resultados.

Con respecto al primer problema de estimación, nuestro estudio es motivado por la necesidad de ajustar modelos matemáticos, cada vez más eficientes, a datos de series temporales correspondientes a dinámicas moleculares para explicar su comportamiento. Otra motivación proviene del estudio de datos correspondientes a descargas neuronales. Para ambos modelos tiene sentido usar las *EDEs*. Si además, de acuerdo con su evolución, estos modelos permanecen mucho tiempo en una pequeña cantidad de configuraciones macroscópicas (estados del espacio donde actúan), puede ser conveniente modelar su dinámica usando *EDEs* hipoeatólicas; pero para lograrlo se deben aproximar los coeficientes de esta ecuación diferencial usando la información que se tiene, por ejemplo los datos los desplazamiento correspondientes a la dinámica molecular o a alas descargas neuronales. Es necesario entonces, definir estimadores para el drift y el coeficiente de difusión de las ecuaciones y garantizar su convergencia. En este trabajo se considera la estimación no paramétrica de los coeficientes de una *EDE* hipoeatólica, caracterizada por una relación de generación y disipación de energía entre el drift y el coeficiente de difusión, conocida como condición de fluctuación-disipación.

Para el análisis de este primer problema: primero se describen los resultados teóricos más relevantes correspondientes a *EDEs* hipoeatólicas caracterizadas por la relación de fluctuación-disipación. Específicamente, se establecen condiciones suficientes de regularidad para sus coeficientes, con el fin de garantizar la existencia de una única solución y de una única medida invariante para el sistema. Segundo, se definen estimadores no paramétricos del tipo Nadaraya-Watson para: la densidad invariante, el drift y el coeficiente de difusión y el potencial del sistema de ecuaciones, y se demuestran teoremas de tipo ergódico por cada uno de estos estimadores. Tercero, se describen los métodos numéricos a considerar para la estimación de los parámetros de la *EDE*. Y finalmente, se presentan resultados de estimación correspondientes a 4 ejemplos específicos, que ponen en evidencia las fortalezas y limitaciones de los

estimadores y de los algoritmos empleados para calcularlos.

En cuanto al segundo problema de estimación, nuestro estudio está orientado a la generación de un método de aproximación completo para la simulación del transporte de desechos orgánicos en cuerpos de agua cerrados y poco profundos. La consideración de este problema de estimación es motivado por la alta contaminación del Lago de Valencia en Venezuela, cuya ubicación geográfica es: $10^{\circ}11'00''N$, $167^{\circ}44'00''W$, y el hecho de que es el cuerpo de agua dulce sin salida al mar más grande del país ($350km^2$ de área y profundidad media de $18m$), y en buen estado podría ser usado para abastecer de aguas blancas a las ciudades Valencia y Maracay (dos de las más grandes y pobladas del país) y a las pequeñas ciudades que las conectan al norte del lago. Además, la contaminación en el lago deteriora el ambiente donde viven aproximadamente millón y medio de personas, y el crecimiento en el nivel de sus aguas debido a la descarga de aguas residuales en él crea una peligrosa situación para las poblaciones más próximas a su frontera. Las investigaciones científicas sobre los procesos de transporte y otros procesos que se llevan a cabo en el lago podrían contribuir significativamente a la creación de planes de monitoreo y saneamiento que le puedan devolver el equilibrio ecológico.

Debido a que el segundo problema de estimación es motivado por la situación del Lago de Valencia, cuya escala de longitud horizontal es mucho más grande que la escala de longitud vertical, nos concentramos en el estudio de dispersión de desechos orgánicos en cuerpos de agua poco profundos. Para los cuerpos de agua con esta característica se determina la velocidad de su fluido usando las ecuaciones de Saint-Venant. De acuerdo con las hipótesis de este modelo bidimensional, tiene sentido concebir el contaminante como una colección de partículas que actúan sobre la superficie del cuerpo de agua. En este contexto, es acertado modelar el desplazamiento de las partículas que forman el contaminante, con modelos estocásticos que determinan las trayectorias de estas partículas sobre la superficie del cuerpo de agua en estudio. De los tres modelos estocásticos que modelan dinámicas de contaminantes en fluidos, nosotros consideramos dos: paseo aleatorio y vuelo aleatorio, el primero está definido por un sistema elíptico de *EDEs* y el segundo por un sistema hipoeĺıptico. Ambos modelos son complementados con una versión de la condición de frontera Neumann adecuada a sistemas estocásticos.

Luego de estudiar el modelo hidrodinámico determinado por las ecuaciones de Saint-Venant y los modelos estocásticos paseo aleatorio y vuelo aleatorio, como una aplicación, se implementan los modelos estocásticos para simular la dispersión real de desechos orgánicos en el Lago de Valencia durante 3215,3 segundos. Para estas implementaciones, se usan las velocidades promedios del Lago de Valencia generadas en [49] y se considera una distribución inicial que simule la clorofila en el Lago de Valencia, en un instante de tiempo específico concebido como el instante inicial de observación de la dispersión de contaminantes en el lago. Se asume la presencia de clorofila en el lago como indicador de la presencia de desechos orgánicos, basados en el hecho de que los componentes fundamentales de este tipo de desechos (fósforo y nitrógeno) son los principales nutrientes de los elementos que contienen clorofila, como las algas y las plantas vasculares [1, 19].

Para determinar la distribución de clorofila en el lago, es necesario resolver un problema de estimación adicional que consiste en aproximar una difusión de distribución estacionaria, definida a partir de una densidad dato cuyo soporte es un subconjunto propio de \mathbb{R}^2 , con clausura compacta y frontera suave. Para resolver este problema: se construye una *densidad dato* normalizando el índice de vegetación de una imagen satelital del Lago de Valencia, se define la *EDE* cuya solución es una difusión que tiene por densidad al *NDVI* normalizado (*overdamped Langevin processes*), y se resuelve numéricamente esta *EDE*, usando el algoritmo de Langevin ajustado con el método Hasting-Metropolis, desarrollado en [47], combinado con un esquema de rebote simétrico desarrollado en [6]. La solución numérica que se obtiene consta de vectores aleatorios independientes cuya distribución es aproximadamente la distribución de clorofila observada en la imagen satelital del lago de donde se obtuvo su *NDVI*. Estos vectores aleatorios son usados como condición inicial en la implementación de los modelos estocásticos, cuyos resultados describen el desplazamiento de los desechos orgánicos en el lago durante 3215,3 segundos,

contados a partir del instante en el que fue tomada la imagen satelital del lago antes mencionada.

Podemos resumir el contenido de la tesis diciendo que en ella se estudian los dos problemas mencionados al comienzo de esta introducción, usando como herramienta fundamental las *EDEs*. Para este fin, desarrollamos la estimación, la simulación y la implementación numérica de modelos de *EDEs* tanto elípticas como hipoelípticas.

Esta tesis consta de cinco capítulos, en el capítulo 1 se presentan las definiciones, propiedades y resultados más relevantes asociados a procesos estocásticos continuos, que fundamentan la respuesta que damos en esta investigación a los problemas de estimación estudiados. Los capítulos 2 y 3 se concentran en la definición, caracterización y evaluación de estimadores no paramétricos para la densidad y los coeficientes de sistemas hipoelípticos de *EDEs*, caracterizados por la condición de fluctuación-disipación. Finalmente, los capítulos 4 y 5 se dedican al estudio e implementación de modelos matemáticos, que describen el transporte de desechos orgánicos en cuerpos de agua cerrados.

Capítulo 1

Marco Teórico

Con la finalidad de introducir un marco teórico para los dos problemas de aplicación que estudiamos, en este capítulo se presentan las definiciones, propiedades y resultados más relevantes, asociados a procesos estocásticos continuos a los cuales se hará referencia en los próximos capítulos.

1.1. Procesos Markovianos continuos.

A lo largo del capítulo consideraremos espacios de probabilidad $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ que serán caracterizados cuando sea necesario. Comenzamos esta sección con dos de las definiciones más importantes de procesos estocásticos continuos: movimiento Browniano y procesos de Markov

Definición 1.1.0.1 Sea d un entero positivo y μ una medida de probabilidad sobre $(\mathbb{R}^d, \mathcal{B}(\mathbb{R}^d))$. El par $\{(B_t, \mathcal{F}_t) : t \geq 0\}$ formado por un proceso estocástico $(B_t)_{t \geq 0}$ de valores en \mathbb{R}^d y una filtración $(\mathcal{F}_t)_{t \geq 0}$, definidos sobre un espacio de probabilidad $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P}^\mu)$, es un movimiento Browniano con distribución inicial μ si se verifica lo siguiente:

- i) $\mathbb{P}^\mu(B_0 \in A) = \mu(A), \forall A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d),$
- ii) Para $0 \leq t \leq s$, los incrementos $B_t - B_s$ son independientes de \mathcal{F}_s y tienen distribución normal con media cero y matriz de covarianza igual a $(t - s)I_d$.

Si μ asigna medida uno a algún $z \in \mathbb{R}^d$, entonces \mathbb{P}^μ es denotado por \mathbb{P}^z y B es un movimiento Browniano d -dimensional que comienza en z .

Definición 1.1.0.2 Sea d un entero positivo y μ una medida de probabilidad sobre $(\mathbb{R}^d, \mathcal{B}(\mathbb{R}^d))$. El par $\{(Z_t, \mathcal{F}_t) : t \geq 0\}$ formado por un proceso estocástico $(Z_t)_{t \geq 0}$ de valores en \mathbb{R}^d y una filtración $(\mathcal{F}_t)_{t \geq 0}$, definidos sobre un espacio de probabilidad $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P}^\mu)$, es un proceso de Markov con distribución inicial μ si se verifica lo siguiente:

- i) $\mathbb{P}^\mu(Z_0 \in A) = \mu(A), \forall A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d),$
 - ii) para todo $t \geq 0, y s \geq 0$
- $$\mathbb{P}^\mu(Z_{t+s} | \mathcal{F}_s) = \mathbb{P}^\mu(Z_{t+s} | Z_s), \quad \mathbb{P}^\mu \text{ c.s.} \quad (1.1)$$

Es posible demostrar que la propiedad ii) de la definición anterior es equivalente a:

- ii') para toda colección $t_0 < t_1 < \dots < t_n < \dots < t_{2n}$ de $\mathbb{N} \cup \{0\}$ y funciones f y g en $\mathbf{B}_b(\mathbb{R}^d)$, se verifica que:

$$\mathbb{E}[f(Z_{t_0}, \dots, Z_{t_{n-1}}) \times g(Z_{t_{n+1}}, \dots, Z_{t_{2n}}) | Z_{t_n}] = \mathbb{E}[f(Z_{t_0}, \dots, Z_{t_{n-1}}) | Z_{t_n}] \times \mathbb{E}[g(Z_{t_{n+1}}, \dots, Z_{t_{2n}}) | Z_{t_n}]. \quad (1.2)$$

De acuerdo con la equivalencia entre **ii)** e **ii')**, un proceso de Markov puede ser interpretado como un proceso cuyo futuro y pasado son condicionalmente independientes dado que se conoce el la información del proceso en el tiempo presente, denotado por t_n en (1.2).

Observación 1.1.0.3 Cada proceso de Markov con distribución inicial μ , posee una familia de funciones;

$$\{P_{s,t}(z, A) : z \in \mathbb{R}^d, s \leq t \text{ en } \mathbb{R}^+ \text{ y } A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)\} \quad \text{donde} \quad P_{s,t}(z, A) = \mathbb{P}^\mu(Z_t \in A | Z_s = z), \quad (1.3)$$

denominadas transiciones de probabilidad del proceso. Conforme a su definición, esta colección de funciones verifica las siguientes propiedades:

- 1) para $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$, s y t fijos, la función $P_{s,t}(\cdot, A) : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^+$ es $\mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$ -medible.
- 2) para $z \in \mathbb{R}^d$, s y t fijos, la función $P_{s,t}(z, \cdot) : \mathcal{B}(\mathbb{R}^d) \rightarrow \mathbb{R}^+$ es una medida de probabilidad.

Las propiedades 1) y 2) garantizan que cada transición de probabilidad $P_{s,t}(z, A)$ de un proceso de Markov $(Z_t)_{t \geq 0}$ sea un núcleo de transición de Markov. La definición formal de núcleos de transición de Markov sigue a continuación.

Definición 1.1.0.4 Una función $P(\cdot, \cdot) : \mathbb{R}^d \times \mathcal{B}(\mathbb{R}^d) \rightarrow \mathbb{R}^+$ tal que: $P(\cdot, A)$ es medible para $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$ fijo y $P(z, \cdot)$ es una medida de probabilidad para $z \in \mathbb{R}^d$ fijo, es llamada núcleo de transición de Markov.

También es posible identificar las probabilidades de transición de un proceso de Markov con operadores. A continuación se definen para luego identificarlos con un proceso de Markov.

Definición 1.1.0.5 Sea $\mathbf{B}_b(\mathbb{R}^d) = \{f : (\mathbb{R}^d, \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)) \rightarrow (\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R})) : f \text{ es acotada}\}$. Un operador lineal y acotado $P(\cdot) : \mathbf{B}_b(\mathbb{R}^d) \rightarrow \mathbf{B}_b(\mathbb{R}^d)$ es llamado operador de Markov si verifica lo siguiente:

- i) $P(\mathbf{1}) = \mathbf{1}$, donde $\mathbf{1} = 1_{\mathbb{R}^d}$.
- ii) $P(f)$ es positiva cuando f es positiva.
- iii) Si una sucesión $(f_n)_n \subset \mathbf{B}_b(\mathbb{R}^d)$ converge puntualmente a un elemento f de $\mathbf{B}_b(\mathbb{R}^d)$, entonces $(P(f_n))_n$ converge puntualmente a $P(f)$.

Se puede decir que las dos últimas definiciones corresponden a funciones diferentes que definen el mismo objeto matemático en el siguiente sentido.

Lema 1.1.0.6 Existe una correspondencia 1-1 entre un núcleo de transición de Markov $P(\cdot, \cdot)$ sobre $(\mathbb{R}^d, \mathcal{B}(\mathbb{R}^d))$ y un operador de Markov $P(\cdot)$ sobre $\mathbf{B}_b(\mathbb{R}^d)$ definida por la relación

$$P(z, A) = P(\mathbf{1}_A)(z). \quad (1.4)$$

Demostración 1 En efecto, dado un operador de Markov $P(\cdot)$, la función $P(z, A) = P(\mathbf{1}_A)$ es un núcleo de transición de Markov porque $P(\cdot)$ es un operador de Markov y eso garantiza que:

- $P(z, A) = P(\mathbf{1}_A)$ es una función medible para $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$ fijo.
- Para z fijo:
 - como $P(\mathbf{1}) = \mathbf{1}$ y $P(\cdot)$ es lineal, $P(z, \emptyset) = P(\mathbf{1}_\emptyset) = 0$.
 - si A y B son disjuntos, $P(z, A \cup B) = P(\mathbf{1}_{A \cup B}) = P(\mathbf{1}_A) + P(\mathbf{1}_B) = P(z, A) + P(z, B)$.

- Si $A_n \uparrow$, entonces $\lim_n A_n = \cup_n A_n$ y de acuerdo con *iii*) en la definición 1.1.0.5,

$$P(z, \lim_n A_n) = P(1_{\cup_n A_n}) = \lim_n P(1_{A_n}) = \lim_n P(z, A_n).$$

De manera reciproca, dado un núcleo de transición de Markov $P(\cdot, \cdot)$, se cumple que $P(z, A) = \int_A P(z, dy)$.
Entonces

$$P(f)(z) = \int P(z, dy) f(y) \quad (1.5)$$

define un operador lineal que verifica *i*) e *ii*) de la definición 1.1.0.5 porque $P(z, A)$ es una probabilidad, y se cumple *iii*) por el teorema de la convergencia dominada de Lebesgue.

Dado un operador de Markov $P(\cdot)$, al evaluarlo en una función f de su dominio, es usual escribir $Pf(z)$ o $(Pf)(z)$ en lugar de $P(f)(z)$, y debido a su correspondencia $1-1$, con un núcleo de transición de Markov dada por (1.4), es usual considerar la misma notación para ambas funciones, como hasta ahora hemos hecho. También, dada una medida de probabilidad μ , se construye una nueva medida de probabilidad como sigue

$$(P\mu)(A) = \int \mu(dz) P(z, A) \quad \text{para } A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d). \quad (1.6)$$

Definición 1.1.0.7 Un proceso de Markov $(Z_t)_{t \geq 0}$ es llamado homogéneo si se verifica lo siguiente:

$$P(Z_t \in A | Z_s = z) = P(Z_{t-s} \in A | Z_0 = z) \quad \text{es decir, } P_{s,t}(z, A) = P_{t-s}(z, A) \quad \text{para } Z \in \mathbb{R}^d \text{ y } A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d). \quad (1.7)$$

De acuerdo con la observación 1.1.0.3 las probabilidades de transición $P_{s,t}(z, A)$ de un proceso de Markov $(Z_t)_{t \geq 0}$ son núcleos de transición de probabilidad, y de acuerdo con el lema 1.1.0.6 estos núcleos están relacionados univocamente con operadores de Markov a través de la identidad en (1.5). Entonces, a cada proceso de Markov le corresponde una familia de operadores $\{P_{s,t}\}_{0 \leq s < t}$ definida por

$$P_{s,t}(f)(z) = \int P_{s,t}(z, dy) f(y). \quad (1.8)$$

Debido a esta correspondencia univoca, en la teoría de procesos estocásticos es usual usar operador de Markov y núcleo de operador de Markov de forma intercambiable. En este trabajo se adopta esta práctica.

La homogeneidad de un proceso de Markov caracterizada en (1.7) implica que para sus operadores en (1.8) se cumple que $P_{s,t} = P_{0,t-s}$ y que en consecuencia se considera la notación P_t en lugar de $P_{0,t}$. También se cumple que $P_{t+s} = P_t \circ P_s$ y esto garantiza que los operadores del proceso de Markov cumplan las propiedades de semigrupo. A un semigrupo como el que acabamos de describir se le llama semigrupo de Markov.

Definición 1.1.0.8 Una medida de probabilidad $\mu: \mathcal{B}(\mathbb{R}^d) \rightarrow \mathbb{R}^+$ es invariante con respecto a un semigrupo de Markov $(P_t)_{t \geq 0}$ si para cualquier $f \in \mathcal{B}_b(\mathbb{R}^d)$ se verifica lo siguiente:

$$\int_{\mathbb{R}^d} (P_t f)(z) \mu(dz) = \int_{\mathbb{R}^d} f(z) \mu(dz), \quad \text{es decir, } P_t \mu = \mu. \quad (1.9)$$

Observación 1.1.0.9 Un proceso de Markov puede ser definido a partir de un semigrupo de operadores de Markov $(P_t)_{t \geq 0}$ y una medida de probabilidad μ . Cuando en particular la medida μ es invariante con respecto al semigrupo, el proceso resultante es estacionario. Para desarrollar esta afirmación y presentar los resultados más relevantes asociados a la ergodicidad, en lo que resta del capítulo asumimos la hipótesis \mathcal{H} que se declara a continuación:

\mathcal{H} Los procesos estocásticos $Z = (Z_t)_{t \geq 0}$ considerados se suponen definidos sobre el espacio medible formado por $\Omega = C([0, \infty), \mathbb{R}^d)$ y la σ -álgebra de Borel $\mathcal{F} = \mathcal{B}(\Omega)$ generada a partir de la topología de convergencia compacta de $C([0, \infty), \mathbb{R}^d)$. También, se supone el uso del proceso de representación de coordenadas definido por: para $w \in C([0, \infty), \mathbb{R}^d)$, $Z_t(w) = w(t)$.

Construcción de un proceso de Markov a partir de un semigrupo de operadores de Markov $\{P_t\}_{t \geq 0}$ y una probabilidad μ .

Sean $n \in \mathbb{N}$, $\{t_i\}_{i=1}^n \subset [0, \infty)$, $\varphi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ una función medible que admite una representación del tipo $\tilde{\varphi} : \mathbb{R}^{nd} \rightarrow \mathbb{R}$, y sea \mathbb{P}^μ sobre \mathcal{F} definida por:

$$\mathbb{P}^\mu(\varphi) = \int_{\mathbb{R}^d} \dots \int_{\mathbb{R}^d} \tilde{\varphi}(z_1, \dots, z_n) P_{t_n - t_{n-1}}(z_{n-1}, dz_n) \dots P_{t_2 - t_1}(z_1, dz_2) \mu(dz_1). \quad (1.10)$$

La función $\mathbb{P}^\mu : \mathcal{F} \rightarrow \mathbb{R}^+$ definida en (1.10) es una medida de probabilidad sobre (Ω, \mathcal{F}) , porque de acuerdo con su construcción verifica las hipótesis del Teorema de extensión de Kolmogorov enunciado en [42, Teorema 2.1.5]. Este teorema también garantiza la existencia de un proceso estocástico $(Z_t)_{t \geq 0}$ sobre (Ω, \mathcal{F}) , con distribución \mathbb{P}^μ . La forma en que está definida \mathbb{P}^μ y las propiedades de los núcleos de transición de probabilidad $(P_t)_t$ que la definen, implican que $(Z_t)_{t \geq 0}$ es un proceso de Markov con distribución inicial μ . Además, la invariancia de μ con respecto a $(P_t)_{t \geq 0}$ permite demostrar que $(Z_t)_{t \geq 0}$ (o de forma equivalente \mathbb{P}^μ), es estacionario, es decir,

$$\text{Para cada } h \geq 0: \{Z_t\}_{t \geq 0} = \{Z_{t+h}\}_{t \geq 0} \text{ en distribución.} \quad (1.11)$$

Es posible caracterizar la estacionaridad de \mathbb{P}^μ , en función de un sistema dinámico:

$$\{\theta_s\}_{s \geq 0} \text{ con } \theta_s : \Omega \rightarrow \Omega \text{ tal que; } \theta_t \circ \theta_s = \theta_{t+s} \text{ y } \mathbb{R}^+ \times \Omega \rightarrow \Omega \text{ medible,} \quad (1.12)$$

$$(s, w) \rightarrow \theta_s(w)$$

formado por los llamados operadores de traslación definidos por:

$$(\theta_s w)(t) = w(s+t) \text{ o de forma equivalente } (\theta_s Z)(t) = Z(s+t). \quad (1.13)$$

En efecto, debido a la invariancia de μ con respecto a $(P_t)_{t \geq 0}$, (1.11) es naturalmente equivalente a:

$$\mathbb{P}^\mu = \mathbb{P}^\mu \circ \theta^{-1} \text{ donde } \mathbb{P}^\mu \circ \theta^{-1} \text{ denota la medida imagen de } \mathbb{P}^\mu \text{ por } \theta_t, . \quad (1.14)$$

La identidad en (1.14) garantiza la invariancia de \mathbb{P}^μ con respecto a θ_t para cada $t \geq 0$. Esta caracterización de la estacionaridad e invariancia de \mathbb{P}^μ con respecto al sistema dinámico $\{\theta_t\}_{t \geq 0}$, permite restringir resultados generales de ergodicidad correspondientes a sistemas dinámicos, a la ergodicidad asociada al par $(\{Z_t\}_{t \geq 0}, \mathbb{P}^\mu)$ construido a partir de: (Ω, \mathcal{F}) definidos en la hipótesis \mathcal{H} , un semigrupo de Markov $(P_t)_{t \geq 0}$ y una medida μ invariante con respecto a $(P_t)_t$. Una presentación de ergodicidad como la antes descrita se expone en la próxima sección, y una presentación más general puede verse en [29].

1.1.1. Ergodicidad

En esta parte se desarrolla la idea de ergodicidad asociada a un proceso estocástico, y se presentan condiciones suficientes para conseguirla. A continuación se define una medida ergódica y se enuncia el teorema ergódico, que es uno de los resultados más importante de la teoría de procesos estocásticos, porque valida el promedio como aproximación *casi segura* de la esperanza correspondiente a muestras aleatorias no necesariamente independientes. Luego de enunciar estos resultados se trabaja sobre las condiciones suficientes para la existencia y unicidad de una medida invariante, debido a que esta es la herramienta principal para la construcción de un proceso para el que se verifique un resultado ergódico.

Teorema 1.1.1.1 (Theorema Ergódico de Birkhoff) Sea $\{P_t\}_t$ un semigrupo de Markov y sea $\mathbf{J}(\{P_t\}_t)$:

$$\mathbf{J}(\{P_t\}_t) = \left\{ \mu : \mathcal{B}(\mathbb{R}^d) \rightarrow [0, 1] : \mu \text{ es un probabilidad y } P_t \mu = \mu \forall t \geq 0 \right\} \quad (1.15)$$

el conjunto de las medidas de probabilidad invariantes con respecto a $\{P_t\}_t$. Sean también: $(\theta_t)_{t \geq 0}$ el sistema dinámico definido en (1.13), \mathbb{P}^μ la medida de probabilidad definida en (1.10) en función de $\{P_t\}_t$ y de alguna medida $\mu \in \mathbf{J}(\{P_t\}_t)$, y $f \in L^1(\mathbb{R}^d, \mu)$. Entonces,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} f(Z_n) = \mathbb{E}^\mu(f | \mathcal{I}) \quad \mu - c.s \quad \text{donde,} \quad \mathcal{I} = \left\{ A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^d) \mid \theta_t^{-1}(A) = A, \forall t \geq 0 \right\}, \quad (1.16)$$

Definición 1.1.1.2 La medida μ , invariante con respecto a $(P_t)_{t \geq 0}$, es ergódica si $\mu(A) \in \{0, 1\} \quad \forall A \in \mathcal{I}$.

Corollary 1.1.1.3 Si μ es ergódica entonces, el resultado en (1.16) se simplifica como sigue

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} f(Z_n) = \mathbb{E}^\mu(f) \quad \mu - c.s, \quad (1.17)$$

Conforme a lo antes expuesto, el resultado de interés en (1.17) es consecuencia de la invariancia de μ con respecto a $\{\mathbb{P}_t\}_{t \geq 0}$ y de su ergodicidad. Es posible demostrar que la ergodicidad es consecuencia de la unicidad de la medida invariante, como es declarado en el siguiente teorema.

Teorema 1.1.1.4 Si un proceso de Markov construido a partir de una colección de operadores de Markov $\{P_t\}_{t \geq 0}$ posee una única medida invariante μ , entonces esta es ergódica.

En efecto, bajo el supuesto de que $\mathbf{J}(\{P_t\}_t)$ definido en (1.15) es distinto del \emptyset , la caracterización la ergodicidad como un punto extremo de $\mathbf{J}(\{P_t\}_t)$, y la caracterización de los conjuntos invariantes de μ en función de $\{P_t\}_{t \geq 0}$, permite demostrar que la ergodicidad de una medida invariante es consecuencia de su unicidad. Una prueba completa de este resultado se puede ver en [29, sección 5].

Existencia y unicidad de una medida invariante μ con respecto a un semigrupo de operadores de Markov

Esta parte está dedicada a la presentación de criterios para la existencia y unicidad de una medida invariante con respecto a un semigrupo de operadores de Markov $\{P_t\}_{t \geq 0}$. Como se evidencia en los próximos resultados, la existencia de por lo menos un elemento de $\mathbf{J}(\{P_t\}_t)$ demanda que P_t envíe el espacio de funciones $C_b(\mathbb{R}^d)$ en el mismo, y la unicidad de una medida invariante demanda que el rango de P_t sea $C_b(\mathbb{R}^d)$, ambas demandas para cada $t \geq 0$.

Definición 1.1.1.5 Se dice que un semigrupo de operadores de Markov $\{P_t\}_{t \geq 0}$ tiene:

- i) la **propiedad de Feller** si $P_t(C_b(\mathbb{R}^d)) \subset C_b(\mathbb{R}^d)$.
- ii) la **propiedad fuerte de Feller** si $P_t(\mathbf{B}_b(\mathbb{R}^d)) \subset C_b(\mathbb{R}^d)$.
- iii) la **propiedad fuerte de Feller en $z \in \mathbb{R}^d$** si $\forall f \in \mathbf{B}_b(\mathbb{R}^d)$ se cumple que $(P_t f)$ es continua en z .

Existencia

Teorema 1.1.1.6 (Krylov-Bogolioubov) Sea $\{\mathbb{P}_t\}_{t \geq 0}$ un semigrupo de Markov que verifica la propiedad de Feller. Si existe una medida μ_0 sobre $(\mathbb{R}^d, \mathcal{B}(\mathbb{R}^d))$ tal que la colección $\{P_t \mu_0\}_{t \geq 0}$ es tight:

$$\text{para cualquier } \epsilon > 0, \exists \text{ un compacto } K \subset \mathbb{R}^d \text{ tal que } (P_t \mu_0)(K) \geq 1 - \epsilon \text{ para todo } t \geq 0. \quad (1.18)$$

Entonces, existe por lo menos una medida de probabilidad μ invariante con respecto a $\{\mathbb{P}_t\}_{t \geq 0}$.

Unicidad

Los principales criterios de unicidad asociados a la medida invariante de un semigrupo de Markov se apoyan en el siguiente lema.

Lema 1.1.1.7 *Si el conjunto de medidas invariantes de un operador de Markov P_t contiene más de un elemento entonces existen al menos dos medidas μ_1 y μ_2 invariantes con respecto a P_t , tales que $\mu_1 \perp \mu_2$.*

Si existen por lo menos dos medidas mutuamente singulares μ_1 y μ_2 , entonces es posible conseguir una partición de \mathbb{R}^d en por lo menos dos subconjuntos $\{R_1, R_2\}$, con la propiedad de que cuando el proceso de Markov, con probabilidad de transición determinada por $\{P_t\}_{t \geq 0}$, comienza en $x \in R_1$ permanecerá casi seguramente en R_1 y lo mismo pasará si comienza en R_2 , es decir, el proceso sólo recorrerá una porción del espacio de fases (conjunto donde toman valores las variables aleatorias que forman parte del proceso de Markov), en consecuencia, el promedio a la izquierda de (1.17) no aproximará con precisión la esperanza que está a su derecha. El recíproco de esta conjetura es intuitivamente como sigue: Si el proceso de Markov recorre casi todo el espacio de fases, sin importar donde está ubicada la posición inicial del proceso $Z_0 = z$, por lo tanto debe existir una única medida invariante con respecto a $\{P_t\}_{t \geq 0}$. Entonces, es precisamente la suficiencia de este recíproco, la condición que intuitivamente implica la identidad del teorema ergódico, ya que, si las realizaciones del proceso (las trayectorias), visitan casi todos los estados de su espacio de fases, esto garantizará que el promedio a la izquierda de (1.17) en el teorema ergódico, aproxime "bien" la esperanza que aparece a la derecha. En efecto, la precisión de esta aproximación también depende de la velocidad de convergencia del promedio a la esperanza, pero esto demanda condiciones más fuertes que serán consideradas en el próximo capítulo.

Lo antes expuesto está relacionado con un criterio de accesibilidad correspondiente a cada punto del espacio de fase de un proceso de Markov e irreducibilidad del proceso. Las definiciones correspondientes se presenta a continuación.

Definición 1.1.1.8 *Sea $\{P_t\}_{t \geq 0}$ un semigrupo de Markov definido sobre $\mathbf{B}_b(\mathbb{R}^d)$, sea $z \in \mathbb{R}^d$ y sea R_λ :*

$$R_\lambda(z, O) = \int_0^\infty e^{-t} P_t(z, O) dt \quad \text{con } O \subset \mathbb{R}^d \text{ abierto y distinto del vacío,} \quad (1.19)$$

*el operador resolvente de P_t para cada $t \geq 0$. Se dice que $z \in \mathbb{R}^d$ es **accesible** para $\{P_t\}_{t \geq 0}$, si para cualquier $y \in \mathbb{R}^d$ y cualquier vecindad O de z se verifica que $R_\lambda > 0$. Note que la definición de R_λ no depende de λ .*

Definición 1.1.1.9 *Un proceso de Markov $\{Z_t\}_t$ es llamado irreducible si:*

$$P_t(z, U) > 0 \quad \text{para cualquier tripleta } (t, z, U) \text{ con } t > 0, \quad z \in \mathbb{R}^d \text{ y } U \text{ abierto en } \mathbb{R}^d \quad (1.20)$$

Estas nociones combinadas con la condición fuerte de Feller permiten formular uno de los criterios de unicidad de medida invariante más usado. Este criterio se enuncia a continuación y su prueba puede verse en [29, sección 7]

Teorema 1.1.1.10 *Supongamos que P_t verifica la propiedad fuerte de Feller en un punto accesible $z \in \mathbb{R}^d$ de P_t . Entonces, existe a lo sumo una medida invariante con respecto a P_t .*

Entre los ejemplos más relevantes de procesos de Markov se encuentran el movimiento Browniano y los procesos de difusión. En lo que resta de esta sección nos concentraremos en las difusiones. Cuando el proceso de Markov considerado es una difusión, bajo ciertas hipótesis, la célebre condición de Hörmander implicará la condición fuerte de Feller y en consecuencia la existencia de una medida ergódica con respecto al semigrupo de operadores determinados por las probabilidades de transición. Volveremos sobre esta condición al final de la próxima subsección.

1.1.2. Difusiones.

En la teoría de procesos estocástico se llama difusión a la solución $Z = (Z_t)_{t \geq 0}$, de una EDE;

$$dZ_t = b(t, Z_t)dt + \sigma(t, Z_t)dB_t, \quad \text{donde:} \quad (1.21)$$

- $Z_t : (\Omega, \mathcal{F}) \rightarrow (\mathbb{R}^d, \mathcal{B}(\mathbb{R}^d))$, con Ω , \mathcal{F} y Z_t como fueron descritos en la observación 1.1.0.9.
- $b : ([0, \infty) \times \mathbb{R}^d, \mathcal{B}([0, \infty)) \times \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)) \rightarrow (\mathbb{R}^d, \mathcal{B}(\mathbb{R}^d))$, es conocida como el drift de la EDE. De acuerdo con su definición $b = (b_1, \dots, b_n)$ con $b_i : [0, \infty) \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ para $i = 1, \dots, n$.
- $\sigma : ([0, \infty) \times \mathbb{R}^d, \mathcal{B}([0, \infty)) \times \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)) \rightarrow (M(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^r), \mathcal{B}(M(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^r)))$, es conocida como el coeficiente de difusión de la EDE. En este caso $\sigma = (\sigma)_{ij}$ con $\sigma_{ij} : [0, \infty) \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ para $i = 1, \dots, n$ y $j = 1, \dots, r$.
- $\{B_t\}_{t \geq 0}$ es un movimiento Browniano estándar r -dimensional, como en la definición 1.1.0.1.

La solución $Z = \{Z_t\}_{t \geq 0}$ de la ecuación en (1.21) es interpretada como la descripción matemática del desplazamiento de una partícula minúscula en un fluido que está en movimiento. Debido a que, a pesar de ser objetos matemáticos diferentes, un proceso estocástico Z y su ley (distribución) $\mathcal{L}(Z)$ proveen la misma información, por lo que es usual caracterizar ambos elementos con las mismas propiedades, por ejemplo, una práctica habitual es identificar a $\mathcal{L}(Z)$ como la solución de la EDE. Nosotros seguimos esa práctica.

Observación 1.1.2.1 *Es posible definir una EDE coordenada a coordenada y/o declarar sus coeficientes como funciones evaluadas sobre todo el proceso, pero la representación en (1.21) es la usual. También es posible demostrar, usando resultados básicos de la teoría de procesos estocásticos, que una solución de (1.21) es un proceso de Markov. Una demostración de esta afirmación se puede ver en [28, capítulo 3].*

Existen dos tipos de soluciones para una EDE: solución fuerte y débil. A continuación se presentan.

Solución fuerte 1.1.2.2 *Una solución fuerte de la EDE en (1.21) sobre un espacio de probabilidad $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ y con respecto a una condición inicial ξ y un movimiento Browniano fijo $\{(B_t, \mathcal{F}_t)\}_{t \geq 0}$, donde $\{\mathcal{F}_t\}_{t \geq 0}$ es una filtración de \mathcal{F} , es un proceso $Z = \{Z_t\}_{t \geq 0}$ de trayectorias continuas que verifica lo siguiente:*

- 1) Z es adaptado a $\{\mathcal{F}_t\}_{t \geq 0}$.
- 2) $\mathbb{P}(Z_0 = \xi) = 1$.
- 3) $\mathbb{P} \left[\int_0^t \left(b(s, Z_s) + \sigma_{ij}^2(s, Z_s) \right) ds < \infty \right] = 1$
- 4) la versión integral de (1.21): $Z_t = Z_0 + \int_0^t b(s, Z_s) ds + \int_0^t \sigma(s, Z_s) dB_s$ para $0 \leq t \leq \infty$ se verifica \mathbb{P} -c.s.

Condiciones suficientes 1.1.2.3 *Las condiciones de suficiencia para la existencia de una única y continua solución fuerte de (1.21) son:*

- i) las funciones $b(t, z)$ y $\sigma(t, z)$ son continuas en t y z y son Lipchitz continuas con respecto a z .
- ii) $b(t, z) \cdot z \leq C(1 + \|z\|^2)$ para alguna constante C .
- iii) $\text{Tr}(\sigma(t, z) \cdot \sigma^T(t, z)) \leq C(1 + \|z\|^2)$ para alguna constante C .

La primera es una condición local que garantiza la existencia y unicidad de una solución $Z = \{Z_t\}_{t \geq 0}$ hasta su tiempo de salida de un conjunto acotado. Las dos últimas son condiciones globales que garantizan la no-exploración de la solución, es decir, que el tiempo de salida de Z_t de cualquier conjunto acotado vaya a ∞ con probabilidad uno, es decir,

$$\tau_n = \inf\{t \geq 0 : |Z_t| \geq n\} \quad \text{con } n \in \mathbb{N}, \text{ y } \zeta = \lim_{n \rightarrow \infty} \tau_n = \infty \quad \text{con probabilidad uno.} \quad (1.22)$$

De acuerdo con su definición, para cada $n \in \mathbb{N}$ se cumple que t_n es un tiempo de parada. El límite ζ en (1.22) es usualmente llamado tiempo de explosión del proceso.

Solución débil 1.1.2.4 Una solución débil de la EDE en (1.21) es una tripleta $\{(Z_t, B_t)_{t \geq 0}, (\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P}), (\mathcal{F}_t)_{t \geq 0}\}$ donde:

- $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ es un espacio de probabilidad y $(\mathcal{F}_t)_{t \geq 0}$ es una filtración de \mathcal{F} .
- $(Z_t, B_t)_{t \geq 0}$ es un proceso adaptado a $(\mathcal{F}_t)_{t \geq 0}$ de trayectorias continuas y $\{(B_t, \mathcal{F}_t)\}_{t \geq 0}$ es un movimiento Browniano r -dimensional
- Se verifican las condiciones 3) y 4) de la definición de solución fuerte 1.1.2.2

Es posible garantizar la existencia y unicidad de soluciones débiles para EDE cuyos coeficientes no verifican las condiciones suficientes 1.1.2.3 para soluciones fuertes. Uno de estos métodos es llamado método de transformación del drift y está basado en el Teorema general de Guirsanov [42, capítulo 8, sección 6]. Un bosquejo de su forma de aplicación se expone a continuación, como referencia consultar [41, capítulo 3, sección 4].

Condiciones suficientes: transformación del drift de Guirsanov 1.1.2.5 Consideremos la EDE como en (1.21) tal que sus coeficientes b y σ no verifican las condiciones suficientes 1.1.2.3 para la existencia y unicidad de una solución fuerte.

- **Existencia:** Supongamos que la EDE

$$dZ_t = \sigma(t, Z_t) dB_t \quad (1.23)$$

es tal que su drift nulo y su coeficiente de difusión σ , si verifican las condiciones suficientes 1.1.2.3, en consecuencia existe una solución $\mathbb{P}_0^{z_0}$ fuerte y única de (1.23), cuando su condición inicial es $z_0 \in \mathbb{R}^d$. Consideremos ahora el proceso $(M_t, \mathcal{F}_t)_{t \geq 0}$ definido por:

$$M_t = \exp\left(-\int_0^t \gamma(s, Z_s) dB_s - \frac{1}{2} \int_0^t \|\gamma(s, Z_s)\|^2 ds\right) \quad \text{con } \gamma(t, z) = \sigma^{-1}(t, z)b(t, z) \quad (1.24)$$

y $\mathcal{F}_t = \sigma(B_s : s \leq t)$, y consideremos también $\{t_n\}_n$ definido en (1.22). Si los coeficientes b y σ de la ecuación (1.21) son tales que la condición de Novikov sobre el evento $\{t \leq \tau_n\}$:

$$\mathbb{E}_0^{z_0} \left[e^{\left(\frac{1}{2} \int_0^{t_n \wedge t} \|\gamma(s, Z_s)\|^2 ds\right)} \right] < \infty \quad \text{para todo } t \geq 0, \quad (1.25)$$

se verifica, entonces el proceso parado $(M_{\tau_n \wedge t})_t$ es una martingala. Si además b y σ son tales que $t_n \uparrow \infty$, entonces $(M_t)_{t \geq 0}$ es una $\mathbb{P}_0^{z_0}$ martingala local.

Por otra parte, de acuerdo con su definición, M_t es inferiormente acotada $\forall t \geq 0$, por lo tanto, si b y σ son tales que:

$$\mathbb{E}_0^{z_0} [M_t] = \mathbb{E}_0^{z_0} [M_0] = 1, \quad (1.26)$$

entonces se cumple que $(M_t)_t$ es una martingala. Como $(M_t)_t$ es una martingala se verifica que:

- por cada $t \geq 0$:

$$P : \mathcal{F}_t \rightarrow [0, 1] \quad \text{definida por} \quad P(A) = \int_A M_t d\mathbb{P}_0^{z_0} \quad \text{para} \quad A \in \mathcal{F}_t \quad (1.27)$$

es una medida de probabilidad, y en general, de acuerdo con su definición, P es un núcleo de transición de probabilidad.

- la función de conjuntos \mathbb{P}^{z_0} en (Ω, \mathcal{F}) definida por (1.10) para $\mu = \delta_{z_0}$ y núcleos de transición de probabilidad $P_t(z, A)$ definidos por

$$P_t(\cdot, \cdot) = P, \quad \text{para } P \text{ definido en (1.27),}$$

es una medida de probabilidad que verifica la condición $P_t = \mathbb{P}^{z_0} \Big|_{\mathcal{F}_t}$

- el proceso $\tilde{B}_t = B_t - \int_0^t \gamma(s, Z_s) ds$ es un movimiento Browniano en $(\Omega, \mathcal{F}, \mathcal{F}_t, \mathbb{P}^{z_0})$ que verifica:

$$dZ_t = \sigma(t, Z_t) dB_t = \sigma(t, Z_t) \times (d\tilde{B}_t + \gamma(t, Z_t) dt) = b(t, Z_t) dt + \sigma(t, Z_t) d\tilde{B}_t \quad (1.28)$$

La identidad en (1.28) implica que el par $(\mathbb{P}^{z_0}, \{\tilde{B}_t\}_{t \geq 0})$ es una solución débil de 1.21.

- **Unicidad:** La construcción anterior, garantiza que cualquier solución de (1.21) se obtiene a partir de la transformación del drift de la única solución $\mathbb{P}_0^{z_0}$ de (1.23) y esto es suficiente para conseguir la unicidad de \mathbb{P}^{z_0} .

De acuerdo con lo anterior, si los coeficientes b y σ son tales que la condición de Novikov en (1.25) se verifica, $\varsigma = \infty$ y (1.26) también se cumple, entonces, usando la construcción anterior (conocida como la transformación del drift de Guirsanov), se puede conseguir una solución única y débil de (1.21).

La observación 1.1.2.1 garantiza que una difusión $Z = \{Z_t\}_{t \geq 0}$ es un proceso de Markov, en consecuencia, está caracterizado por sus operadores de transición $\{P_{t,s}\}$ definidos por:

$$(P_{s,t}f)(z) = \mathbb{E}(f(Z_t) | Z_s = z). \quad (1.29)$$

Es posible demostrar que cuando los coeficientes de la ecuación diferencial en (1.21) no dependen del tiempo t , la difusión solución Z (también llamada difusión de Itô), es un proceso de Markov homogéneo, es decir, que verifica (1.7), la prueba de esto se puede ver en ([42, sección 7.1, capítulo 7]). Nuestro interés recae sobre las difusiones que satisfacen EDEs del tipo,

$$dZ_t = b(Z_t) dt + \sigma(Z_t) dB_t, \quad (1.30)$$

es decir, difusiones homogéneas (también llamadas difusiones de Itô).

En ocasiones es necesario identificar la distribución $\mathbb{P}(\cdot)$ y la esperanza $\mathbb{E}(\cdot)$ de eventos determinados por una difusión, $Z = \{Z_t\}_{t \geq 0}$ en función de su distribución inicial, por ejemplo, si μ es tal que $\mathbb{P}(Z_0 \in A) = \mu(A)$ para todo $A \in \mathcal{F}$, entonces se usa \mathbb{P}^μ en lugar de \mathbb{P} , y \mathbb{E}^μ en lugar de \mathbb{E} . Cuando $\mu(dy) = \delta_z(dy)$, para algún $z \in \mathbb{R}^d$, se usa \mathbb{P}^z y \mathbb{E}^z , para la distribución y las esperanza asociadas al proceso respectivamente. En este trabajo ya se ha hecho uso de esta práctica habitual: en (1.10) para la construcción de un proceso de Markov a partir de un semigrupo de operadores de Markov $\{P_t\}_{t \geq 0}$ y una probabilidad μ , y durante la descripción del método de transformación del drift de Guirsanov 1.1.2.5.

El desarrollo que sigue sólo corresponde a difusiones homogéneas.

Generador infinitesimal de una EDE

Para muchas aplicaciones es fundamental asociar a la solución $Z = \{Z_t\}_{t \geq 0}$ de la EDE en (1.30) un operador diferencial de segundo orden. Este operador es conocido como generador infinitesimal de Z , es usualmente denotado por \mathcal{L} y es definido por

$$(\mathcal{L}f)(z) = \lim_{t \downarrow 0} \frac{\mathbb{E}^z(f(Z_t)) - f(z)}{t}, \quad (1.31)$$

sobre el conjunto

$$D_{\mathcal{L}} = \left\{ f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R} : \forall z \in \mathbb{R}^d, \exists \lim_{t \downarrow 0} \frac{\mathbb{E}^z(f(Z_t)) - f(z)}{t} \right\} \quad (1.32)$$

$$D_{\mathcal{L}}(z) = \left\{ f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R} : \lim_{t \downarrow 0} \frac{\mathbb{E}^z(f(Z_t)) - f(z)}{t}, \text{ existe} \right\}. \quad (1.33)$$

Cuando en particular $f \in C_0^2(\mathbb{R}^d)$, usando la formula de Itô, se consigue:

i) reescribir a \mathcal{L} en términos de los coeficiente b y σ de la ecuación diferencial como sigue:

$$(\mathcal{L}f)(z) = \sum_i b_i(z) \frac{\partial f}{\partial z_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} (\sigma \sigma^T)_{ij}(z) \frac{\partial^2 f}{\partial z_i \partial z_j}, \quad (1.34)$$

ii) el siguiente caso particular de la llamada **Formula de Dynkin**:

$$\mathbb{E}^z [f(X_t)] = f(z) + \mathbb{E}^z \left[\int_0^t \mathcal{L}(f(X_s)) ds \right] \quad (1.35)$$

ii) la diferenciabilidad con respecto a t de $P_t(f)$ y la caracterización con respecto a \mathcal{L} que sigue:

$$\text{para } u(t, z) = \mathbb{E}^z [f(Z_t)] \text{ se consigue que } \frac{\partial u}{\partial t} = \mathbb{E}^z [\mathcal{L}f(Z_t)]. \quad (1.36)$$

Recíprocamente, es posible caracterizar la distribución de una difusión en términos del generador infinitesimal \mathcal{L} , asociado al semigrupo de Markov determinado por sus transiciones de probabilidad. Esto es posible usando las ecuaciones conocidas como: Kolmogorov's backward equation y Kolmogorov's forward equation. A continuación se enuncian formalmente estos resultados.

Kolmogorov's forward equation 1.1.2.6 (Kolmogorov's forward equation) Sean $Z = \{Z_t\}_{t \geq 0}$ una solución de (1.30), \mathcal{L} su generador infinitesimal, $f \in C_0^2(\mathbb{R}^d)$ y $z_0 \in \mathbb{R}^d$. Supongamos que las transiciones de probabilidad de $(Z_t)_{t \geq 0}$ tienen densidad $p_t(z_0, z)$, es decir, que se verifica lo siguiente:

$$\mathbb{E}^{z_0} [f(Z_t)] = \int_{\mathbb{R}^d} f(z) p_t(z_0, z) dz. \quad (1.37)$$

Si $p_t(z_0, \cdot) : z \rightarrow p_t(z_0, z)$ es continua para cada t y z_0 , entonces $p_t(z_0, \cdot)$ satisface:

$$\frac{\partial}{\partial t} \phi(z) = \mathcal{L}^* \phi(z) \quad \text{donde } \mathcal{L}^* \text{ denota el operador adjunto de } \mathcal{L}, \quad (1.38)$$

conocida como la Kolmogorov forward equation, la cual de forma explícita, se escribe como sigue,

$$\frac{\partial}{\partial t} \phi(z) = - \sum_i \frac{\partial}{\partial z_i} (b_i \phi)(z) + \sum_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial z_i \partial z_j} (a_{ij} \phi)(z) \quad \forall z \in \mathbb{R}^d \text{ y } \phi \in C_0^2(\mathbb{R}^d), \quad (1.39)$$

donde $a = \frac{1}{2} \sigma \sigma^T$.

La ecuación en (1.39) también es conocida como la ecuación de Fokker Planck. La importancia de este resultado es que para difusiones de las que no se tiene información explícita de su distribución, se puede aproximar su densidad de transición resolviendo numéricamente la ecuación diferencial (1.39).

Kolmogorov's backward equation 1.1.2.7 Sean $Z = \{Z_t\}_{t \geq 0}$ una solución de (1.30), \mathcal{L} su generador infinitesimal, $f \in C_0^2(\mathbb{R}^d)$ y $z \in \mathbb{R}^d$.

i) Sea

$$u(t, z) = \mathbb{E}^z [f(Z_t)]. \quad (1.40)$$

Entonces,

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \mathcal{L}u, \quad t \geq 0, \quad (1.41)$$

$$u(0, z) = f(z) \quad (1.42)$$

ii) Si $w(t, z) \in C^{1,2}([0, \infty) \times \mathbb{R}^d)$ es una función acotada que satisface (1.41), entonces $w = u$ con u definido por (1.40).

Este resultado permite caracterizar la invariancia de una medida μ con respecto al semigrupo de Markov P_t definido por,

$$(P_t f)(z) = \mathbb{E}^z [f(Z_t)]. \quad (1.43)$$

como sigue.

Caracterización de Invariancia 1.1.2.8 Una medida μ es invariante con respecto a $(P_t)_{t \geq 0}$ si:

$$\int_{\mathbb{R}^d} (\mathcal{L}f)(z) \mu(dz) = 0. \quad (1.44)$$

Esto se debe a que, para $f \in C_0^2(\mathbb{R}^d)$ se cumple que $P_t(f) \in C^{1,2}([0, \infty) \times \mathbb{R}^d)$ y satisface (1.41); entonces, sustituyendo (1.41) en (1.44) se verifica que

$$0 = \int_{\mathbb{R}^d} \mathcal{L}(P_t f)(z) \mu(dz) = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\partial}{\partial t} [(P_t f)(z)] \mu(dz) = \frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathbb{R}^d} (P_t f)(z) \mu(dz), \quad (1.45)$$

y en consecuencia $\int_{\mathbb{R}^d} (P_t f)(z) \mu(dz)$ es constante como función de t , en particular:

$$\int_{\mathbb{R}^d} (P_t f)(z) \mu(dz) = \int_{\mathbb{R}^d} (P_0 f)(z) \mu(dz) = \int_{\mathbb{R}^d} f(z) \mu(dz) \quad (1.46)$$

que es la propiedad que define la invariancia.

Si Z_0 es distribuída por la probabilidad μ , entonces se puede demostrar la estacionaridad de la difusión. Debido a la estacionaridad que hereda Z de la invariancia de μ cuando esta es su distribución inicial, es usual llamar a μ distribución estacionaria cuando verifica (1.44) o (1.46).

Cuando el generador infinitesimal \mathcal{L} es autoadjunto, es decir $\mathcal{L} = \mathcal{L}^*$, las ecuaciones de Kolmogorov (1.38) y (1.41) coinciden.

De acuerdo con la teoría de operadores, bajo el supuesto de que el generador infinitesimal \mathcal{L} es acotado, se verifica que el sistema en (1.41)-(1.42) tiene por solución la función

$$u(t, z) = e^{-t\mathcal{L}}(f(z)), \quad (1.47)$$

pero \mathcal{L} definido por (1.34), es generalmente no acotado, por eso, para conseguir un resultado como el de (1.47) es necesario considerar otras hipótesis sobre \mathcal{L} . A continuación se enuncia el resultado que corresponde a un generador infinitesimal, no acotado, del semigrupo de operadores de Markov correspondiente a una difusión.

Teorema 1.1.2.9 Sea $Z = \{Z_t\}_{t \geq 0}$ una difusión estacionaria con distribución marginal invariante μ y generador infinitesimal autoadjunto \mathcal{L} . Supongamos que:

- el espectro de \mathcal{L} : $\{\lambda \in \mathbb{C} : \mathcal{L} - \lambda I \text{ es no invertible}\}$, es discreto.
- 0 es un autovalor simple de \mathcal{L} asociado a la autofunción constante $1_{\mathbb{R}^d}$.

Entonces, el semigrupo de operadores de Markov $\{P_t\}_t$ de Z , definido en (1.43), verifica lo siguiente,

$$P_t = e^{-\mathcal{L}t} \quad \text{y} \quad \|P_t f\|_{L^2_\mu} \leq e^{-t\lambda_1} \|f\|_{L^2_\mu}. \quad (1.48)$$

donde λ_1 es el autovalor de \mathcal{L} mayor a cero mas pequeño.

Los resultados en (1.48) permiten garantizar que la difusión Z es un proceso ergódico, es decir se verifica (1.17), y la velocidad de convergencia asociada a esta identidad es exponencial. Esta convergencia exponencial corresponde a un resultado que será expuesto más adelante.

Un problema más complejo que el de caracterizar las densidades marginales de una EDE cuya solución toma valores en \mathbb{R}^d , es la consideración de este problema, para para EDEs cuya solución toma valores en un subconjunto propio de \mathbb{R}^d .

Como un caso particular que demanda los resultados antes desarrollados, en la primera sección del capítulo 4 se resuelve el problema que consiste en construir una difusión de distribución marginal invariante μ , definida a partir de una densidad dato φ^2 : $d\mu(z) = \varphi^2(z)dz$, cuyo soporte es un subconjunto propio de \mathbb{R}^d , de clausura compacta y frontera suave.

Condición de Hörmander

Como mencionamos al final de la sección 1.1.1, para procesos de Markov que satisfacen EDEs existe un célebre resultado conocido como **La condición de Hörmander** que caracteriza condiciones suficientes para la ergodicidad del proceso. A continuación se enuncia una versión de esta condición y se derivan algunos resultados.

Sea $Z = \{Z_t\}_{t \geq 0}$ una solución de la EDE en (1.30), y sea \mathcal{L} su generador infinitesimal. Sean también

$$B_0 = \{\sigma_{\cdot,j} : j = 1, \dots, r\} \quad (1.49)$$

$$B_{k+1} = B_k \cup \{[g, \sigma_{\cdot,j}] : g \in B_k, j = 1, \dots, r\} \quad (1.50)$$

donde $\sigma_{\cdot,j}$ denota la j -ésima columna del coeficiente de difusión σ en (1.30) y

$$[g, \sigma_{\cdot,j}](z) = Dg(x)\sigma_{\cdot,j}(z) - D\sigma_{\cdot,j}(z)g(z), \quad (1.51)$$

donde Dg y $D\sigma_{\cdot,j}$ denotan las derivadas de Frechet de g y $\sigma_{\cdot,j}$ respectivamente.

Para cada $x \in \mathbb{R}^d$ se definen los conjuntos

$$B_\infty(z) = \cup_{k \geq 0} B_k(z) \quad \text{y} \quad \bar{B}_k(z) = \text{span}\{g(x) : g \in B_k\}. \quad (1.52)$$

La condición de Hörmander se verifica en un punto $z \in \mathbb{R}^d$ si se cumple la siguiente identidad:

$$\bar{B}_\infty(z) = \mathbb{R}^d. \quad (1.53)$$

De acuerdo con la definición de \mathcal{L} es sencillo demostrar que, definiendo

$$A_0 = \sum_{i=1}^d b_i \partial_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d \sum_{k=1}^d \sigma_{ik} \partial_i (\sigma_{jk}) \partial_j, \quad \text{y} \quad A_k = \sum_{j=1}^d \sigma_{ik} \partial_i \quad k = 1, \dots, r.$$

se puede reescribir \mathcal{L} como

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^d A_k^2 + A_0 \quad (1.54)$$

y demostrar que (1.53) es equivalente a la siguiente condición:

$$L(A_0, \dots, A_r) = \text{Span}(\partial_1, \dots, \partial_d). \quad (1.55)$$

para L definido por la relación

$$C \in L(A_0, \dots, A_r) \Rightarrow [C, A_i] \in L(A_0, \dots, A_r), \text{ donde } i = 0, \dots, r. \text{ para } [C, A_i] \text{ definido como en (1.51)}. \quad (1.56)$$

Teorema 1.1.2.10 *Si la condición de Hörmander se consigue para algún punto accesible $z \in \mathbb{R}^d$, entonces para cualquier $f \in \mathbf{B}_b(\mathbb{R}^d)$, la función $P_t f$ es suave en una vecindad de z .*

La combinación de este teorema con los teoremas 1.1.1.6 y 1.1.1.10, reúnen condiciones suficientes para garantizar la existencia de una única medida invariante para un semigrupo de operadores $\{P_t\}_t$ de interés. En el próximo capítulo usaremos este conjunto de resultados para garantizar la ergodicidad de una medida de probabilidad específica .

Difusiones Elípticas e Hipoelípticas de interés.

De acuerdo con los problemas de estimación considerados en este trabajo, sera necesario estudiar EDEs homogéneas:

$$dZ_t = b(Z_t)dt + \sigma(Z_t)dB_t, \quad \text{con } Z_t = (X_t, Y_t). \quad (1.57)$$

que generan difusiones elípticas e hipoelípticas. Una forma de caracterizarlas consiste en señalar que, en el caso de las EDEs elípticas el coeficiente de difusión: σ , verifica que:

$$\sum_{i,j} (\sigma \sigma^T)_{ij}(z) z_i z_j \geq 0, \quad \text{para } z = (x_1, \dots, x_m, y_1, \dots, y_m) \text{ para } d = 2m, \quad (1.58)$$

y en el caso de las hipoelípticas se verifica que

$$\sum_{i,j} (\sigma \sigma^T)_{ij}(z) y_i y_j \geq 0. \quad (1.59)$$

Una manera práctica de diferenciar estos dos tipos de ecuaciones diferenciales es que en el caso de las hipoelípticas para una subcolección de sus componentes el término de difusión es un vector nulo. Esto será evidenciado en los próximos ejemplos.

Estos dos tipos de EDEs modelan diversos eventos de la realidad, a continuación algunos ejemplos.

1) Las elípticas permiten:

- aproximar la difusión correspondiente a una densidad dato φ^2 de interes:

$$dX_t = dB_t + \frac{1}{2} \nabla \log(\varphi(B_t)) dt, \quad t \geq t_0. \quad (1.60)$$

Las ecuaciones de este tipo son conocidas como Overdamped Langevin process. Su solución es una difusión que tiene distribución límite estacionaria, con medida de probabilidad marginal invariante μ definida por $d\mu(z) = \varphi^2(z) dz$.

- modelar el recorrido de partículas en un cuerpo de agua cerrado:

$$dX_t = U(X_t, Y_t)dt + \sqrt{2D_1(X_t, Y_t)}dB_t^1 \quad (1.61)$$

$$dY_t = V(X_t, Y_t)dt + \sqrt{2D_2(X_t, Y_t)}dB_t^2 \quad (1.62)$$

donde (X_t, Y_t) representa la posición de la partícula sobre la superficie del cuerpo de agua (U, V) representa la velocidad de la corriente en el cuerpo de agua, $(\sqrt{2D_1}, \sqrt{2D_2})$ representan la difusión, el coeficiente que modela la incertidumbre, y $(B_t^1)_{t \geq 0}$ y $(B_t^2)_{t \geq 0}$ denotan movimientos Brownianos independientes.

2) Con las hipoelípticas se modelan:

- dinámicas moleculares:

$$\begin{cases} dX_t = Y_t dt, \\ dY_t = -(\nabla V(X_t) + c(X_t, Y_t)Y_t)dt + \sigma(X_t, Y_t)dB_t. \end{cases} \quad (1.63)$$

En este caso X_t denota la posición de la partícula en estudio en el instante de tiempo t y Y_t su velocidad. Estos sistemas modelan dinámicas que preservan energía, $\sigma(X_t, Y_t)dB_t$ es interpretado como el término de fluctuación que produce la energía, y $c(X_t, Y_t)Y_t dt$ representa el término de fricción que disipa la energía.

- Transporte de partículas en cuerpos de agua:

$$dX_t = (U + U_t)dt, \quad t \geq t_0, \quad (1.64)$$

$$dY_t = (V + V_t)dt, \quad t \geq t_0, \quad (1.65)$$

$$dU_t = -\left(\frac{1}{T_L}\right)U_t dt + (\hat{K})^{1/2}dB_t^1, \quad t \geq t_0, \quad (1.66)$$

$$dV_t = -\left(\frac{1}{T_L}\right)V_t dt + (\hat{K})^{1/2}dB_t^2, \quad t \geq t_0, \quad (1.67)$$

Igual que en el caso elíptico (1.61)-(1.62), el par (X_t, Y_t) representa la posición de la partícula sobre la superficie de un cuerpo de agua, (U, V) representa la velocidad de la corriente en el cuerpo de agua, D es un factor correspondiente al coeficiente de difusión como se definió antes y $(B_t^1)_{t \geq 0}$ y $(B_t^2)_{t \geq 0}$ son nuevamente movimientos Brownianos independientes. Las variables U_{t_0} y V_{t_0} son independientes, de distribución normal con media cero y varianza $\frac{\hat{K}T_L}{2}$, y (U_t, V_t) representa la velocidad estocástica de la partícula inducida por el fluido turbulento. En la sección 5.1.3 del capítulo 5 veremos que las ecuaciones hipoelípticas (1.64)-(1.67), ofrecen un modelo que teóricamente es similar al modelado por las ecuaciones elípticas en (1.61)-(1.62), pero que aproxima mejor la realidad.

1.2. Mixing.

En el estudio de los procesos estocásticos, la independencia entre los elementos del proceso es muy importante porque, entre otras cosas, es una de las condiciones suficientes para muchos de los teoremas límites más relevantes en la teoría de probabilidades de amplia aplicación a la estadística.

En vista de que la mayoría de los procesos que modelan "situaciones reales" no verifican esta condición, ha sido necesario definir coeficientes, en función de las σ -álgebras asociadas al proceso, que de alguna manera midieran el grado de dependencia (o de independencia), entre las componentes del proceso.

En general, son cinco los coeficientes que con frecuencia son llamados coeficientes de dependencia asintótica. En esta sección definiremos sólo dos de estos coeficientes: α -mixing y β -mixing porque estarán asociados con resultados correspondientes a la velocidad de convergencia en el teorema ergódico para los modelos que estudiamos.

1.2.1. Procesos α -mixing y β -mixing.

Sea $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$ un espacio de probabilidad, sean \mathcal{A} y \mathcal{B} dos sub- σ -álgebras de \mathcal{F} y sea $Z = \{Z_t\}_{t \geq 0}$ un proceso estocástico en (Ω, \mathcal{F}) que toma valores en \mathbb{R}^d .

Recordemos que si ν es una medida signada en \mathcal{F} decimos que la función de conjuntos $|\nu|(\cdot)$ definida en \mathcal{F} por la ecuación

$$|\nu|(A) = \sup \sum_{n=1}^{\infty} |\nu(A_n)| \quad \text{con } A \in \mathcal{F}, \quad (1.68)$$

donde el supremo es tomado sobre todas las particiones $(A_n)_{n \geq 1}$ de A , es la medida de variación total de ν y decimos que $\|\nu\| = |\nu|(\Omega)$ es la **variación total** de ν . En lo que sigue, denotaremos por

$$\text{var}_{B \in \mathcal{B}}(\nu(B)) \quad (1.69)$$

a la **variación total** de la restricción de la medida ν a la σ -álgebra $\mathcal{B} \subseteq \mathcal{F}$.

Definición 1.2.1.1 Para las sub- σ -álgebras \mathcal{A} y \mathcal{B} en \mathcal{F} definiremos los coeficientes α y β como sigue.

- Denotaremos por $\alpha(\mathcal{A}, \mathcal{B})$ al **coeficiente de mezcla fuerte** definido por

$$\alpha(\mathcal{A}, \mathcal{B}) = \sup_{\{A \in \mathcal{A}, B \in \mathcal{B}\}} \{|\mathbb{P}(A)\mathbb{P}(B) - \mathbb{P}(A \cap B)|\} \quad (1.70)$$

- Denotaremos por β al **coeficiente de regularidad absoluta** definido por

$$\beta(\mathcal{A}, \mathcal{B}) = \mathbb{E} \left\{ \text{var}_{B \in \mathcal{B}} \left(\mathbb{P}(B|\mathcal{A}) - \mathbb{P}(B) \right) \right\} \quad (1.71)$$

Que α sea interpretado como un coeficiente de dependencia asintótica es evidente de (1.70).

Observación 1.2.1.2 De acuerdo con [20, p.3],

$$\beta(\mathcal{A}, \mathcal{B}) = \sup_{C \in \mathcal{A} \otimes \mathcal{B}} \{|\mathbb{P}_{\mathcal{A} \otimes \mathcal{B}}(C) - \mathbb{P}_{\mathcal{A}} \otimes \mathbb{P}_{\mathcal{B}}(C)|\}, \quad (1.72)$$

donde $\mathbb{P}_{\mathcal{A}}$ y $\mathbb{P}_{\mathcal{B}}$ representan la restricción de \mathbb{P} a \mathcal{A} y a \mathcal{B} respectivamente y $\mathbb{P}_{\mathcal{A} \otimes \mathcal{B}}$ es la medida imagen de \mathbb{P} en $(\Omega \times \Omega, \mathcal{A} \otimes \mathcal{B})$ por la función inyectiva i de (Ω, \mathcal{F}) en $(\Omega \times \Omega, \mathcal{A} \otimes \mathcal{B})$ que a cada $\omega \in \Omega$ lo envía a $(\omega, \omega) \in \Omega \times \Omega$.

De acuerdo con la definición de i , para $A \times B \in \mathcal{A} \otimes \mathcal{B}$ se tiene que

$$\mathbb{P}_{\mathcal{A} \otimes \mathcal{B}}(A \times B) = \mathbb{P}(\{\omega \in \Omega : i(\omega) \in A \times B\}) = \mathbb{P}(A \cap B). \quad (1.73)$$

Podemos decir que la identidad anterior caracteriza a la medida $\mathbb{P}_{\mathcal{A} \otimes \mathcal{B}}$ porque se verifica en una clase generadora de la σ -álgebra en la que está definida. Esto de alguna manera justifica que el coeficiente β sea interpretado como una medida de dependencia asintótica porque, en (1.72) cuando $C = A \times B$

$$|\mathbb{P}_{\mathcal{A} \otimes \mathcal{B}}(C) - \mathbb{P}_{\mathcal{A}} \otimes \mathbb{P}_{\mathcal{B}}(C)| = |\mathbb{P}(A \cap B) - \mathbb{P}(A)\mathbb{P}(B)|. \quad (1.74)$$

Por lo anterior; podemos ver que en (1.70) para definir $\alpha(\mathcal{A}, \mathcal{B})$, el supremo es tomado sobre una sub-clase de la clase donde se toma el supremo para definir $\beta(\mathcal{A}, \mathcal{B})$ en (1.72) y esto implica que

$$\alpha(\mathcal{A}, \mathcal{B}) \leq \beta(\mathcal{A}, \mathcal{B}). \quad (1.75)$$

En particular, para un proceso estocástico Z nos interesa considerar las σ -álgebras,

$$\mathcal{A}_0^u = \sigma(Z_s : s \leq u) \quad \text{y} \quad \mathcal{B}_u^\infty = \sigma(Z_s : s > u) \quad \text{con } s \text{ y } u \text{ en } \mathbb{R}^+$$

En este caso consideraremos las siguientes notaciones $\beta(\mathcal{A}, \mathcal{B})$ por $\beta_Z(\mathcal{A}_0^u, \mathcal{B}_{u+t}^\infty)$.

Definición 1.2.1.3 Para Z definimos los coeficientes $\alpha_Z(t)$ y $\beta_Z(t)$ por,

$$\alpha_Z(t) = \sup_u \{\alpha_Z(\mathcal{A}_0^u, \mathcal{B}_{u+t}^\infty)\} \quad \text{y} \quad \beta_Z(t) = \sup_u \{\beta_Z(\mathcal{A}_0^u, \mathcal{B}_{u+t}^\infty)\}.$$

Decimos que Z es α -mixing si $\lim_{t \rightarrow \infty} \alpha_Z(t) = 0$ y que es β -mixing si,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \beta_Z(t) = 0. \quad (1.76)$$

Proposición 1.2.1.4 La sucesiones $\beta_Z(t)$ y $\alpha_Z(t)$ son decrecientes.

Demostración 2 De acuerdo con (1.71) y con la definición anterior

$$\beta_Z(t) = \sup_u \beta(\mathcal{A}_0^u, \mathcal{B}_{u+t}^\infty) = \sup_u \mathbb{E} \left\{ \text{var}_{B \in \mathcal{B}_{u+t}^\infty} (\mathbb{P}(B|\mathcal{A}_0^k) - \mathbb{P}(B)) \right\}, \quad (1.77)$$

entonces, para un u fijo, si $t' > t$ $\mathcal{B}_{u+t'}^\infty \subseteq \mathcal{B}_{u+t}^\infty$ por consiguiente, el conjunto de particiones que serán consideradas para calcular $\text{var}_{B \in \mathcal{B}_{u+t'}^\infty} (\mathbb{P}(B|\mathcal{A}_0^k) - \mathbb{P}(B))$ es más pequeño que el conjunto de particiones que serán consideradas para calcular $\text{var}_{B \in \mathcal{B}_{u+t}^\infty} (\mathbb{P}(B|\mathcal{A}_0^k) - \mathbb{P}(B))$, por lo tanto, como la esperanza es monótona, al tomar supremo en u

$$\beta_Z(t') \leq \beta_Z(t) \quad \text{para } t' > t. \quad (1.78)$$

Lo antes expuesto se verifica de forma análoga para $\alpha_Z(t)$.

Como para cada $t \in \mathbb{R}^+$ se cumple que $\beta_Z(t) \geq 0$, $\alpha_Z(t) \geq 0$, las sucesiones $(\beta_Z(t))_t$ y $(\alpha_Z(t))_t$ están acotadas inferiormente por 0, entonces, por la proposición anterior, para ambas sucesiones, siempre existe el límite cuando t va a ∞ , es decir, siempre podemos saber cuando Z es α -mixing o β -mixing.

Proposición 1.2.1.5 Si Z es β -mixing, entonces, Z es α -mixing.

Demostración 3 Este resultado se obtiene por el uso de la desigualdad (1.75).

Proposición 1.2.1.6 Si Z es un proceso de Markov homogéneo, con núcleo de transición de probabilidad $P_t(x, A)$ entonces,

$$\beta_Z(t) = \sup_s \int \mu(dx) \|P_t(x, A) - P_{t+s}(A)\|, \quad (1.79)$$

donde P_{t+s} es la distribución de Z_{t+s} .

Demostración 4 Ver ([16], p. 313).

Capítulo 2

Difusiones hipoelípticas caracterizadas por la condición de fluctuación-disipación.

En este capítulo se abordarán problemas de inferencia no paramétrica asociados a los Procesos Estocásticos Hamiltonianos amortiguados caracterizados por la condición de fluctuación-disipación. Esta condición proporciona un balance preciso entre el drif (que se encarga de remover energía en promedio) y el término aleatorio, que garantiza que la medida canónica sea preservada por la dinámica que define al sistema Hamiltoniano en estudio y al mismo tiempo implica la simplificación de las hipótesis que permiten concluir que el proceso solución del sistema es ergódico.

El objetivo de este capítulo es presentar estimadores convergentes para las cantidades desconocidas envueltas en la formulación del proceso estocástico de interés. Para ello, en la sección 2.1 se define el sistema de ecuaciones diferenciales estocásticas correspondiente, se enuncian sus hipótesis y se demuestra la existencia y unicidad de la solución del sistema y de una medida invariante. Adicionalmente se enuncian condiciones bajo las cuales se demuestra la ergodicidad exponencial de la solución del sistema. En la sección 2.2 se proporciona una construcción explícita de funciones de Lyapunov apropiadas que permiten garantizar que la velocidad de convergencia de las probabilidades de transición, asociadas al sistema en estudio, a la probabilidad invariante es exponencial (ergodicidad exponencial). Finalmente, en la sección 2.3 se enuncian y demuestran los principales resultados de inferencia estadística correspondientes al sistema considerado.

2.1. Definición del sistema, existencia y unicidad.

Definición del sistema

Un proceso estocástico Hamiltoniano amortiguado está definido por el sistema:

$$\begin{cases} dX_t = Y_t dt, \\ dY_t = -(\nabla V(X_t) + c(X_t, Y_t) Y_t) dt + \sigma(X_t, Y_t) dB_t, \end{cases} \quad (2.1)$$

donde $Z_t = (X_t, Y_t) \in \mathbb{R}^{2d}$, con d entero y $d > 0$, denota la solución del sistema en t , $V : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ es el potencial del sistema, $c : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow M(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^d)$ es la fuerza de amortiguación, $\sigma : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow M(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^d)$ es el término de difusión y B es un movimiento Browniano d -dimensional estándar en \mathbb{R}^d .

Nos interesa principalmente el siguiente sistema,

$$\begin{cases} dX_t = Y_t dt, \\ dX_t = -(\nabla V(X_t) dt + \sigma^2(X_t) Y_t) dt + (2\beta^{-1})^{\frac{1}{2}} \sigma(X_t) dB_t, \end{cases} \quad (2.2)$$

que es un caso particular del sistema definido en (2.1). En este sistema el coeficiente de difusión sólo depende de x y el coeficiente de amortiguación c está relacionado con el coeficiente de difusión por la relación $c(x, y) = \sigma^2(x)$, que es conocida como la condición de fluctuación-disipación.

Hipótesis.

En este capítulo se supone lo siguiente,

\mathcal{H}_0 La función σ pertenece a $C(\mathbb{R}^d, M(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^d))$ y su primera y segunda derivada son acotadas. También, para todo $x \in \mathbb{R}^d$ $\sigma(x)$ es simétrica y verifica que $\sigma(x) \geq \sigma_0 I_d$ (en el sentido de la forma cuadrática), para una constante positiva $\sigma_0 > 0$. Cuando una función en $C(\mathbb{R}^d, M(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^d))$ verifica la última condición se dice que es uniformemente elíptica.

\mathcal{H}_1 El potencial V es inferiormente acotado y pertenece a $C^\infty(\mathbb{R}^d)$.

Observación 1 De acuerdo con la definición del sistema en (2.2), el coeficiente de amortiguación c es una matriz simétrica y uniformemente elíptica.

2.1.1. Existencia y unicidad de la solución del sistema.

Como se definió en el primer capítulo, en lo que sigue $\Omega = C(\mathbb{R}^+, \mathbb{R}^{2d})$ denotará el espacio de funciones continuas de \mathbb{R}^+ en \mathbb{R}^{2d} . La σ -álgebra \mathcal{F} considerada será la σ -álgebra de borel generada a partir de la topología de convergencia compacta, para cada $w \in \Omega$ y $t \geq 0$ se define $Z_t(w) = w(t) = (X_t(w), Y_t(w))$ y en función de esta definición, la filtración a considerar es $(\mathcal{F}_t)_{t \geq 0}$ con $\mathcal{F}_t = \sigma(Z_s : 0 \leq s \leq t)$.

Observación 2 A continuación se enuncian las hipótesis $\mathcal{H}'_{0,1}$, $\mathcal{H}'_{0,2}$ y \mathcal{H}'_1 , para c y σ en (2.1), que serán consideradas durante la demostración del teorema de existencia y unicidad de una solución para el sistema en (2.1). Las hipótesis en $\mathcal{H}'_{0,1}$ asociadas a σ son más débiles que las enunciadas en \mathcal{H}_0 , declarada arriba, y en el caso de V \mathcal{H}'_1 coincide con \mathcal{H}_1 , también declarada arriba. De esta forma la prueba de existencia y unicidad que se presenta a continuación también garantiza la existencia y unicidad de una solución para (2.2). La demostración expuesta es un desarrollo de la prueba que aparece en [55, páginas 209-210].

$\mathcal{H}'_{0,1}$ La función σ está en $C^\infty(\mathbb{R}^d, M(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^d))$, es simétrica y verifica que $0 < \sigma(x) \leq \sigma'_0 I_d$ (en el sentido de la forma cuadrática), para una constante positiva $\sigma'_0 > 0$.

$\mathcal{H}'_{0,2}$ El coeficiente de amortiguación c es continuo y para todo N : $\sup_{|x| \leq N, y \in \mathbb{R}^d} |c(x, y)|_{H.S.} < \infty$, y existen constantes c_0 y L tales que $c^s(x, y) \geq c_0 I_d > 0$, $\forall |x| > L$ y $y \in \mathbb{R}^d$.

\mathcal{H}'_1 El potencial V es inferiormente acotado y pertenece a $C^\infty(\mathbb{R}^d)$.

Teorema 2.1.1.1 Sea $z_0 = (x_0, y_0) \in \mathbb{R}^{2d}$ y sea \mathbb{P}^{z_0} la distribución de la solución de la EDE definida en (2.1), cuando $c = 0$, $V = 0$ y la distribución inicial del sistema es δ_{z_0} . Entonces, el sistema en (2.1) admite una única solución débil \mathbb{P}^{z_0} (una medida de probabilidad sobre (Ω, \mathcal{F})) y no explosiva, tal que $\forall t \geq 0$ se verifica:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbb{P}^{z_0}}{d\mathbb{P}^{z_0}} \Big|_{\mathcal{F}_t} &= \exp \left(- \int_0^t \sigma^{-1}(X_s, Y_s) [c(X_s, Y_s) Y_s + \nabla_x V(X_s)] dB_s \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \int_0^t |\sigma^{-1}(X_s, Y_s) (c(X_s, Y_s) Y_s + \nabla V(X_s))|^2 ds. \right) \end{aligned} \quad (2.3)$$

Demostración 5 La existencia y unicidad de la solución será demostrada verificando que se cumplen las condiciones 1.1.2.5 en donde se describe el procedimiento de transformación del drift de Guirsanov. Consideremos entonces la EDE

$$\begin{cases} dX_t = Y_t dt, \\ dY_t = \sigma(X_t, Y_t) dB_t, \end{cases} \quad (2.4)$$

con condición inicial δ_{z_0} , es decir, la ecuación en (2.1) con $c = 0$, $V = 0$ y $Z_0 = z_0$ c.s. De acuerdo con $\mathcal{H}'_{0,1}$ el sistema en (2.4) posee una única y no explosiva solución fuerte \mathbb{P}^{z_0} .

Si para $R > y_0$ y $n \in \mathbb{N}$ se define

$$\tau_R = \inf\{t \geq 0 : |Y_t| = R\} \quad y \quad \zeta = \sup_n \inf\{t \geq 0 : |Z_t| \geq n\}, \quad (2.5)$$

se tiene que estas dos variables aleatorias son tiempos de parada y que $\sup_{R \geq 0} \tau_R \leq \zeta$ debido a que por (2.4) $|Y_t| \leq R$ y $|X_t| \leq |x_0| + Rt$ para todo $t \leq \tau_R$. Consideremos ahora el proceso $(M_t)_{t \geq 0}$ definido por:

$$M_t = \exp\left(-\int_0^t \gamma(X_s, Y_s) dB_s - \frac{1}{2} \int_0^t |\gamma(X_s, Y_s)|^2 ds\right) \quad \text{con} \quad \gamma(x, y) = -\sigma^{-1}(x, y)[c(x, y)y + \nabla_x V(x)] \quad (2.6)$$

Este proceso es una $\mathbb{P}_0^{z_0}$ martingala local debido a que $(\tau_R)_R \uparrow \infty$ y por cada $R \geq 0$ las hipótesis $\mathcal{H}'_{0,1}$ y $\mathcal{H}'_{0,2}$ garantizan que se verifique la condición de Novikov sobre el evento $\{t \leq \tau_R\}$:

$$\mathbb{E}_0^{z_0} \left[e^{\left(\frac{1}{2} \int_0^{\tau_R \wedge t} |\gamma(X_s, Y_s)|^2 ds\right)} \right] < \infty \quad \text{para todo } t \geq 0, \quad (2.7)$$

lo cual es suficiente para que el proceso de parada $(M_{\tau_R \wedge t})_t$ sea una martingala. Ahora bien, como $(M_t)_t$ es una martingala local inferiormente acotada, es suficiente demostrar que $\mathbb{E}_0^{z_0}[M_t] = \mathbb{E}_0^{z_0}[M_0] = 1$ para conseguir que es una martingala. Lo último garantiza que por cada $t \geq 0$:

$$P_t : \mathcal{F}_t \rightarrow [0, 1] \quad \text{definida por} \quad P_t(A) = \int_A M_t d\mathbb{P}_0^{z_0} \quad \text{para} \quad A \in \mathcal{F}_t \quad (2.8)$$

es una medida de probabilidad, que la colección $(P)_{t \geq 0}$ define una medida de probabilidad \mathbb{P}^{z_0} sobre (Ω, \mathcal{F}) , como en (1.10), tal que $P_t = \mathbb{P}^{z_0}|_{\mathcal{F}_t}$, y que el proceso $\tilde{B}_t = B_t - \int_0^t \gamma(s, Z_s) ds$ es un movimiento Browniano en $(\Omega, \mathcal{F}, \mathcal{F}_t, \mathbb{P}^{z_0})$ que verifica lo siguiente

$$\begin{cases} dX_t = Y_t dt, \\ dY_t = \sigma(X_t, Y_t) dB_t = \sigma(X_t, Y_t)(d\tilde{B}_t + \gamma(X_t, Y_t) dt) \\ \quad = \sigma(X_t, Y_t) d\tilde{B}_t - [c(X_t, Y_t) Y_t + \nabla_x V(X_t)] dt. \end{cases} \quad (2.9)$$

La identidad en (2.9) implica que \mathbb{P}^{z_0} es una solución débil de (2.1) que verifica la identidad (2.3). La construcción anterior, descrita durante la declaración de condiciones suficientes para la existencia de una solución débil 1.1.2.5 y conocida como la transformación del drift de Guirsanov, garantiza que cualquier solución de (2.1) se obtiene a partir de la transformación del drift de la única solución $\mathbb{P}_0^{z_0}$ de (2.4) y esto es suficiente para conseguir la unicidad de \mathbb{P}^{z_0} . De acuerdo con lo anterior, si

$$\mathbb{E}_0^{z_0}[M_t] = \mathbb{E}_0^{z_0}[M_0] = 1, \quad (2.10)$$

entonces (2.1) tiene una solución única que verifica la identidad (2.3). A continuación demostraremos que $\mathbb{E}_0^{z_0}[M_t] = \mathbb{E}_0^{z_0}[M_0] = 1$ y que \mathbb{P}^{z_0} no explota utilizando la función de prueba $H(x, y) = \frac{1}{2}|y|^2 + V(x)$ del tipo de Liapunov.

Al evaluar el generador infinitesimal \mathcal{L} en H se verifica que

$$\mathcal{L}H(x, y) = \frac{\text{tr}(\sigma^2)}{2} + y \cdot \nabla_x V(x) - (c(x, y)y + \nabla_x V(x)) \cdot y \quad (2.11)$$

$$= \frac{\text{tr}(\sigma^2)}{2} - c^s(x, y)y \cdot y, \quad (2.12)$$

y de las hipótesis $\mathcal{H}'_{0,1}$ y $\mathcal{H}'_{0,2}$ obtenemos que $c^s(x, y) \geq AI_d$ para alguna constante $A > 0$ y que $\sigma^2(x, y) \leq d\sigma_0^2$, entonces para $\hat{H} = H - \inf_{\mathbb{R}^d} V + 1$ se satisface lo siguiente:

$$\mathcal{L}\hat{H} \leq b\hat{H} \quad (2.13)$$

donde $b = \max\{2A, \frac{d\sigma_0^2}{2}\}$. Por otra parte, usando la formula de Ito se puede demostrar que $(e^{bt \wedge \tau_R} \hat{H}_{t \wedge \tau_R})_{t \geq 0}$ es una \mathbb{P}^{z_0} supermartingala, y por definición de \hat{H} y τ_R que $\hat{H}(Z_{\tau_R}) \geq \frac{R^2}{2}$ cuando $\{\tau_R < \infty\}$. Conseguimos entonces que

$$\mathbb{P}^{z_0}(\tau_R \leq t) \leq \frac{2e^{bt}}{R^2} \mathbb{E}_z \left(\mathbf{1}_{\{\tau_R \leq t\}} e^{-bt \wedge \tau_R} \hat{H}(Z_{t \wedge \tau_R}) \right) \leq \frac{2e^{bt}}{R^2} \hat{H}(z) \rightarrow 0 \quad \text{cuando } R \rightarrow \infty \quad (2.14)$$

lo cual garantiza que la solución \mathbb{P}^{z_0} no explota debido y también garantiza que

$$\mathbb{E}_0^{z_0}(M_t) = \int M_t d\mathbb{P}_0^z \geq \int \mathbf{1}_{\{\tau_R > t\}} M_{t \wedge \tau_R} d\mathbb{P}_0^z = \mathbb{P}^{z_0}(\tau_R > t) \rightarrow 1 \quad \text{cuando } R \rightarrow \infty \quad (2.15)$$

y esto concluye la prueba. ■

De acuerdo con lo desarrollado en la sección 1.1.2, la EDE que estudiamos en este capítulo es de tipo homogénea porque sus coeficientes no dependen del tiempo y esto garantiza que los procesos $\{Z_h\}_{h \geq 0}$ y $\{Z_{s+h}\}_{h \geq 0}$ tengan la misma ley sobre el espacio de probabilidad $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P}^z)$ para $z \in \mathbb{R}^{2d}$, una prueba de esta afirmación está en [42, página 109]. También, haciendo uso de las propiedades de esperanza condicional, se puede demostrar que \mathbb{P}^z cumple la propiedad de Markov y en consecuencia, que por cada $z \in \mathbb{R}^{2d}$ la solución $(\{Z_t\}_{t \geq 0}, \mathbb{P}^z)$ de (2.1) sea un proceso de Markov. Además, debido a la homogeneidad de la difusión, las probabilidades de transición $\{P_t(z, dz')\}_{t \geq 0}$ forman un semigrupo para el que se verifican las identidades $P_t \circ P_s = P_{t+s}$ y

$$\mathbb{P}(Z_t \in A \mid Z_s) = P_{t-s}(Z_s, A), \quad (2.16)$$

donde $\mathbb{P} : \mathcal{F} \rightarrow [0, 1]$ es una medida de probabilidad definida por

$$\mathbb{P}(B) = \int \mathbb{P}^z(B) \mu(dz), \quad \text{donde } \mu \text{ es una medida de probabilidad en } \mathcal{F}_0. \quad (2.17)$$

La probabilidad \mathbb{P} es usualmente denotada por \mathbb{P}^μ . Cuando μ está concentrada en un punto $z \in \mathbb{R}^{2d}$ se tiene que \mathbb{P}^z es una versión de \mathbb{P}^μ .

2.1.2. Condiciones suficientes para la ergodicidad: Existencia y unicidad de una medida invariante.

Ahora demostraremos la existencia de una medida de probabilidad ergódica para la solución $(\{Z_t\}_{t \geq 0}, \mathbb{P}^z)$ de (2.2), cuya existencia se acaba de demostrar. Esto se hará en dos pasos,

- i) primero: veremos que se cumple la identidad de Hörmander para conseguir, usando el Teorema 1.1.2.10, que sus operadores de transición evaluados en $f \in \mathbf{B}_b(\mathbb{R}^d)$: $P_t(f)$, resultan ser funciones continuas en z , es decir, son strong Feller; esto garantizará, usando el Teorema 1.1.1.10, la existencia de a lo sumo una medida invariante.

ii) segundo: consideraremos un candidato a medida y demostraremos que se verifica (1.44) para demostrar que es invariante con respecto al semigrupo $\{P_t(z, dz')\}_{t \geq 0}$.

De acuerdo con el teorema 1.1.1.4, estos dos resultados implican la existencia de una única medida invariante, y esto es suficiente para concluir su ergodicidad (ver sección).

Propiedad fuerte de Feller: Suficiencia para la existencia de a lo sumo una probabilidad invariante

A continuación demostraremos que se verifica la propiedad de Hörmander (1.55). Sea $f \in C_0^{1,2}(\mathbb{R}^{2d})$, por la definición del generador infinitesimal \mathcal{L} en la sección 1.1.2, para el proceso en (2.2):

$$\mathcal{L}f(x, y) = \left(\frac{1}{\beta} \sum_{i,j=1}^d (\sigma^2)_{ij}(x) \partial_{y_i} \partial_{y_j} + y \cdot \nabla_x - (\sigma^2(x)y + \nabla V(x)) \cdot \nabla_y \right) f(x, y). \quad (2.18)$$

Considerando los operadores diferenciales

$$A_0 = \sum_{j=1}^d y_j \cdot \partial_{x_j} - \sum_{j=1}^d \partial_{x_j} V(x) \partial_{y_j} - \sum_{j=1}^d y_j \sum_{l=1}^d (\sigma^2)_{jl}(x) \partial_{y_l}, \quad A_k = \sum_{j=1}^d \sigma_{kj}(x) \partial_{y_j} \quad k = 1, \dots, d \quad (2.19)$$

$$\text{y} \quad [A_0, A_k] = A_0 A_k - A_k A_0, \quad (2.20)$$

de dominio $C_0^{1,2}(\mathbb{R}^{2d})$, las ecuaciones en (2.19) y (2.20) permiten verificar de forma directa que

$$\text{Span}(A_0, \dots, A_d, [A_0, A_1], \dots, [A_0, A_d]) \subset \text{Span}(\partial_{x_1}, \dots, \partial_{x_d}, \partial_{y_1}, \dots, \partial_{y_d}) \quad (2.21)$$

y la identidad se consigue porque σ es uniformemente elíptica y esto garantiza que sus filas (o columnas) formen una base para \mathbb{R}^{2d} y en consecuencia las dimensiones de $\text{Span}(A_0, \dots, A_d, [A_0, A_1], \dots, [A_0, A_d])$ y $\text{Span}(\partial_{x_1}, \dots, \partial_{x_d}, \partial_{y_1}, \dots, \partial_{y_d})$ coinciden.

Existencia y unicidad de una medida invariante con respecto al semigrupo $\{P_t\}_t$ de operadores de Markov correspondientes a la solución de (2.2).

Consideremos ahora la función

$$p_s^\beta(x, y) = C(\beta) e^{-\beta H(x, y)} \quad \text{con} \quad H(x, y) = \frac{1}{2} y^T y + V(x) \quad \text{y} \quad C = \int_{\mathbb{R}^{2d}} p_s^\beta(x, y) dx dy \quad (2.22)$$

entonces p_s^β es una densidad porque es no negativa e integra 1. Por otra parte, de acuerdo con la caracterización de invariancia 1.1.2.8, la condición $\int_{\mathbb{R}^{2d}} \mathcal{L}f(x, y) p_s^\beta(x, y) dx dy = 0$ para toda función $f \in C_0^{1,2}(\mathbb{R}^{2d})$, es suficiente para que la probabilidad $\mu(dz) = p_s^\beta(z) dz$ sea invariante con respecto a P_t para todo $t \geq 0$. Entonces, p_s^β es invariante con respecto a P_t debido a lo siguiente:

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^{2d}} \mathcal{L}f(x, y) p_s^\beta(x, y) dx dy \\ &= \int_{\mathbb{R}^{2d}} \left(\{f, H\} + \frac{e^{\beta H}}{\beta} \mathbf{div}_y \left(\frac{\beta}{2} \sigma^2 e^{-\beta H} \nabla_y f \right) \right) p_s^\beta(x, y) dx dy \end{aligned} \quad (2.23)$$

$$= \frac{1}{\beta} \int_{\mathbb{R}^{2d}} \{f, e^{-\beta H}\} dx dy + \frac{1}{\beta} \int_{\mathbb{R}^{2d}} \mathbf{div}_y (p_s^\beta(x, y) \sigma^2(x) \nabla_y f(x, y)) dx dy \quad (2.24)$$

$$= 0, \quad (2.25)$$

donde (2.23) se debe a que, de acuerdo con (2.18) es posible reescribir \mathcal{L} como

$$\mathcal{L}(f) = \{f, H\} + \frac{e^{\beta H}}{\beta} \mathbf{div}_y \left(\frac{\beta}{2} \sigma^2 e^{-\beta H} \nabla_y f \right), \quad \text{donde} \quad \{f, H\} = (\nabla_x f)^T \nabla_y H - (\nabla_y f)^T \nabla_x H,$$

(2.24) se debe a la definición del operador $\{\cdot, \cdot\}$ y (2.25) se consigue usando el teorema de Green.

2.2. Pruebas de ergodicidad usando funciones de Lyapunov

En esta parte se considerarán dos ejemplos específicos del proceso estudiado y se demostrará, usando explícitas construcciones de funciones de Lyapunov y, considerando la identidad (1.2.1.6), su ergodicidad exponencial, es decir, se demostrará que existen constantes $C > 0$ y $\lambda > 0$ tales que ,

$$\int_{\mathbb{R}^{2d}} \sup_{\{f: f \text{ es medible, } |f| \leq 1\}} \left| P_t f(z) - \int_{\mathbb{R}^{2d}} f d\mu \right| \mu(dz) \leq C e^{-\lambda t}. \quad (2.26)$$

2.2.1. Difusión hipoelíptica en \mathbb{R}^{2d} bajo una condición sobre el drift

En lo que sigue consideraremos el sistema (2.2) y asumiremos que se satisfacen las hipótesis \mathcal{H}_0 y \mathcal{H}_1 y que se satisface la llamada condición del drift:

$$\langle \nabla V(x), \frac{x}{\|x\|} \rangle \rightarrow \infty \text{ a } \|x\| \rightarrow \infty \text{ donde } \|\cdot\| \text{ es la norma euclidea usual en } \mathbb{R}^d. \quad (2.27)$$

De acuerdo con el Teorema 5.2c en [39], para conseguir la ergodicidad exponencial del proceso que resuelve (2.2) es suficiente garantizar la existencia de una función de Lyapunov Ψ , de un compacto $K \subset \mathbb{R}^{2d}$ y de constantes C y $\varepsilon > 0$ que satisfagan la desigualdad,

$$-\frac{\mathcal{L}\Psi}{\Psi} \geq \varepsilon \mathbf{1}_{K^c} - C \mathbf{1}_K. \quad (2.28)$$

Entonces, la prueba consistirá en, primero se definirá la función de Lyapunov a considerar, luego se caracterizará el cociente $\frac{\mathcal{L}\Psi}{\Psi}$, y finalmente, en función de esta caracterización y de \mathcal{H}_0 , \mathcal{H}_1 y (2.27), se construirá el compacto K y las constantes C y ε que junto a Ψ satisfarán (2.28). La prueba que presentamos sigue las principales líneas de la prueba del Teorema 4.1 en [55], pero con una ligera diferencia que favorece pedagógicamente la demostración. Para simplificar la notación asumimos que $\beta = 2$.

Definición de Ψ y declaración de propiedades: Sean $\Phi: \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ y $G: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ definidas por:

$$\Phi(t) = e^{-\frac{1}{t}} \quad \text{y} \quad G(x) = \begin{cases} \Phi(\|x\|) \frac{x}{\|x\|} & \text{si } x \neq \mathbf{0} \in \mathbb{R}^d \\ 0 & \text{si } x = \mathbf{0} \in \mathbb{R}^d \end{cases} \quad (2.29)$$

De acuerdo con las definiciones en (2.29), Φ es creciente, $0 \leq \Phi \leq 1$, y G tiene derivada continua y

$$\lim_{\|x\| \rightarrow \infty} \|\partial_{x_j} G_i(x)\|_{HS} = 0, \quad \text{donde } \|\cdot\|_{HS} \text{ denota la norma de Hilbert-Schmidt} \quad (2.30)$$

A partir de G definimos la función de Lyapunov Ψ como sigue

$$\Psi(x, y) = e^{F(x, y) - \inf_{\mathbb{R}^{2d}} F} \quad \text{con} \quad F(x, y) = a \left(\frac{1}{2} \|y\|^2 + V(x) \right) + b \langle G(x), y \rangle, \quad (2.31)$$

para constantes a y b que serán caracterizadas más adelante con el objetivo de garantizar (2.28). Como el argumento de la exponencial que define Ψ es no negativo, $\Psi \geq 1$, es decir

$$F(x, y) - \inf_{\mathbb{R}^{2d}} F \geq 0 \quad \forall (x, y) \in \mathbb{R}^{2d} \implies \Psi \geq 1. \quad (2.32)$$

Caracterización de $\frac{\mathcal{L}\Psi}{\Psi}$: al evaluar Ψ en el operador infinitesimal (2.18) del sistema en (2.2) y usar las propiedades de la derivada conseguimos:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}\Psi &= \left(\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d (\sigma^2)_{ij}(x) \partial_{y_i} \partial_{y_j} + y \cdot \nabla_x - (\sigma^2(x)y + \nabla V(x)) \cdot \nabla_y \right) \Psi(x, y). \\
&= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d (\sigma^2)_{ij}(x) \partial_{y_i} \left(\Psi(x, y) \partial_{y_j} F(x, y) \right) + (y \cdot \nabla_x - (\sigma^2(x)y + \nabla V(x)) \cdot \nabla_y) \Psi(x, y) \\
&= \Psi(x, y) \left[\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d (\sigma^2)_{ij}(x) \partial_{y_i} F(x, y) \partial_{y_j} F(x, y) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d (\sigma^2)_{ij}(x) \partial_{y_i} \partial_{y_j} F(x, y) \right. \\
&\quad \left. + (y \cdot \nabla_x - (\sigma^2(x)y + \nabla V(x)) \cdot \nabla_y) F(x, y) \right] \\
&= \Psi(x, y) \left[\frac{1}{2} \|\sigma(x) \nabla_y F\|^2 + \mathcal{L}F \right], \tag{2.33}
\end{aligned}$$

y de la identidad (2.33) obtenemos,

$$-\frac{\mathcal{L}\Psi}{\Psi} = -\mathcal{L}F - \frac{1}{2} \|\sigma(x) \nabla_y F\|^2. \tag{2.34}$$

A continuación, usando (2.18), evaluamos \mathcal{L} en cada término de F definida en (2.31):

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(a \frac{1}{2} \|y\|^2) &= a \left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^d (\sigma^2)_{ii}(x) - \langle \sigma^2(x)y, y \rangle - \langle y, \nabla V(x) \rangle \right) \\
\mathcal{L}(aV(x)) &= a \langle \nabla V(x), y \rangle \\
\mathcal{L}(b \langle G(x), y \rangle) &= b \sum_{j=1}^d \sum_{i=1}^d (\partial_{x_j} G_i(x)) y_i y_j - b \langle y, \sigma^2(x)G(x) \rangle - b \langle \nabla V(x), G(x) \rangle
\end{aligned}$$

luego, usando la linealidad de \mathcal{L} y las tres últimas identidades

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(F(x, y)) &= a \left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^d (\sigma^2)_{ii}(x) - \langle \sigma^2(x)y, y \rangle \right) \\
&\quad + b \left(\sum_{j=1}^d \sum_{i=1}^d \partial_{x_j} G_i(x) y_i y_j - \langle y, \sigma^2(x)G(x) \rangle - \langle \nabla V(x), G(x) \rangle \right). \tag{2.35}
\end{aligned}$$

Además, calculando $\nabla_y F$ para el segundo término a la izquierda de (2.34)

$$\frac{1}{2} \|\sigma(x) \nabla_y F\|^2 = \frac{1}{2} \|\sigma(x) (ay + bG(x))\|^2. \tag{2.36}$$

Finalizamos esta parte sustituyendo (2.35) y (2.36) en (2.34) para conseguir la caracterización buscada:

$$\begin{aligned}
-\frac{\mathcal{L}\Psi}{\Psi} &= -a \left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^d (\sigma^2)_{ii}(x) - \langle \sigma^2(x)y, y \rangle \right) \\
&\quad - b \left(\sum_{j=1}^d \sum_{i=1}^d \partial_{x_j} G_i(x) y_i y_j - \langle y, \sigma^2(x)G(x) \rangle - \langle \nabla V(x), G(x) \rangle \right) - \frac{1}{2} \|\sigma(x) (ay + bG(x))\|^2. \tag{2.37}
\end{aligned}$$

Construcción de cota inferior para $-\frac{\mathcal{L}\Psi}{\Psi}$: Ahora acotaremos inferiormente cada término a la derecha de (2.37), esto permitirá elegir a y b convenientes para la definición de C , ε y \mathbf{K} .

De acuerdo con \mathcal{H}_1 , existen constantes no negativas σ_0 y σ_1 tales que se verifica que $\sigma_0 I_d \leq \sigma \leq \sigma_1 I_d$ en norma cuadrática, entonces usando el desarrollo en norma cuadrática que corresponde se consigue,

$$-a \frac{1}{2} \sum_{i=1}^d (\sigma^2)_{ii}(x) \geq -a \frac{d}{2} \sigma_1^2, \quad a < \sigma^2(x)y, y \geq a \sigma_0^2 \|y\|^2 \quad y \quad (2.38)$$

$$\|\sigma(x)(ay + bG(x))\|^2 \leq \sigma_1^2(2a^2\|y\|^2 + 2b^2\|G(x)\|^2) \leq \sigma_1^2(2a^2\|y\|^2 + 2b^2) \quad \forall (x, y) \in \mathbb{R}^{2d}. \quad (2.39)$$

Además del desarrollo en con respecto al cuadrado de la norma, para la primera desigualdad en (2.39) se usa la desigualdad triangular de la norma, y para la última desigualdad se usa que $|G| \leq 1$.

También, usando la acotación de σ en norma cuadrática y la *linealidad* del producto interno;

$$\langle (a\sigma^2(x) - b\partial_{x_j} G_i(x))y, y \rangle \geq \sigma_0^2 a \|y\|^2 - b \langle \partial_{x_j} G_i(x)y, y \rangle \quad \forall (x, y) \in \mathbb{R}^{2d} \quad (2.40)$$

Por otra parte dado $\varepsilon' > 0$, de (2.30) y de la continuidad de $\partial_{x_j} G_i$ tenemos que se puede elegir $b > 0$ tal que

$$b \|\partial_{x_j} G_i(x)\|_{HS} \leq \varepsilon', \quad (2.41)$$

y esto implica que, sustituyendo la desigualdad anterior en (2.40):

$$\langle (a\sigma^2(x) - b\partial_{x_j} G_i(x))y, y \rangle \geq (a\sigma_0^2 - \varepsilon') \|y\|^2 \quad \forall (x, y) \in \mathbb{R}^{2d}. \quad (2.42)$$

La definición de G y (2.27) garantizan que para toda constante $M > 0$ existe $L_M > 0$ tal que

$$\langle \nabla V(x), G(x) \rangle \geq M \quad \text{si} \quad \|x\| > L_M, \quad (2.43)$$

y esto, junto a la continuidad de G y ∇V , implican la existencia de una constante $M_1 > 0$ tal que

$$\langle \nabla V(x), G(x) \rangle \geq -M_1 \quad \forall x \in \mathbb{R}^{2d}. \quad (2.44)$$

Finalmente, como σ y G son acotadas por definición, se concluye la existencia de una constante $M_2 > 0$ tal que,

$$b \langle y, \sigma^2(x)G(x) \rangle \geq -M_2 \|y\| \quad \forall (x, y) \in \mathbb{R}^{2d}. \quad (2.45)$$

Las desigualdades anteriores garantizan lo siguiente. Sustituyendo (2.38), (2.39), (2.42), (2.44) y (2.45) en (2.37) conseguimos que,

$$-\frac{\mathcal{L}\Psi}{\Psi} \geq (a\sigma_0^2 - a^2\sigma_1^2 - \varepsilon') \|y\|^2 - M_2 \|y\| - \left(\frac{ad\sigma_1^2}{2} + b^2\sigma_1^2 + M_1 b \right) \quad \forall (x, y) \in \mathbb{R}^{2d}, \quad (2.46)$$

y sustituyendo (2.38), (2.39), (2.42), (2.43), (2.44) y (2.45) en (2.37) se consigue que,

$$-\frac{\mathcal{L}\Psi}{\Psi} \geq (a\sigma_0^2 - a^2\sigma_1^2 - \varepsilon') \|y\|^2 - M_2 \|y\| - \left(\frac{ad\sigma_1^2}{2} + b^2\sigma_1^2 \right) + Mb, \quad \forall M > 0, y \in \mathbb{R}^d, \|x\| > L_M \quad (2.47)$$

Construcción de K , C y ε : Sea a tal que $a\sigma_0^2 - a^2\sigma_1^2 > 0$, en este caso diremos que se verifica la condición \mathcal{C}_1 , y b tal que ε' satisface $a\sigma_0^2 - a^2\sigma_1^2 - \varepsilon' > 0$ (b y ε' están asociados por (2.41)), en este caso diremos que se verifica la condición \mathcal{C}_2 . Construiremos K en tres pasos y en el camino garantizaremos la existencia de C y ε . De acuerdo con \mathcal{C}_1 y \mathcal{C}_2 :

paso 1: $x \in \mathbb{R}^d$, $\|y\| > L$. El lado derecho de (2.46) es un polinomio de segundo grado de variable $\|y\|$, con coeficiente de segundo orden mayor a cero y raíces reales. Entonces, dado $\varepsilon > 0$, (2.46) garantiza la existencia de una constante $L > 0$ tal que

$$-\frac{\mathcal{L}\Psi}{\Psi} \geq \varepsilon \quad \forall (x, y) \in \mathbb{R}^{2d} \quad \text{tal que} \quad \|y\| > L. \quad (2.48)$$

paso 2: $\|x\| > L_M$, $\|y\| \leq L$. El lado derecho de (2.47) es un polinomio de segundo grado de variable $\|y\|$, con coeficiente de segundo orden mayor a cero, cuyo ínfimo crece a ∞ cuando M crece a ∞ , $\forall y \in \mathbb{R}$. Por lo tanto, existe $M > 0$ tal que se cumple (2.48) cuando $\|x\| > L_M$, es decir,

$$-\frac{\mathcal{L}\Psi}{\Psi} \geq \varepsilon \quad \forall (x, y) \in \mathbb{R}^{2d} \quad \text{tal que} \quad \|y\| < L \quad \text{y} \quad \|x\| > L_M. \quad (2.49)$$

paso 3: $\|x\| \leq L_M$, $\|y\| \leq L$. De (2.46) conseguimos que $\forall x \in \mathbb{R}^d$ y $\|y\| \leq L$,

$$-\frac{\mathcal{L}\Psi}{\Psi} \geq -M_2\|y\| - \left(\frac{ad\sigma_1^2}{2} + b^2\sigma_1^2 + Mb \right) \geq -C(L) \quad \text{con} \quad C(L) = M_2L + \left(\frac{ad\sigma_1^2}{2} + b^2\sigma_1^2 + Mb \right).$$

En particular,

$$-\frac{\mathcal{L}\Psi}{\Psi} \geq -C(L) \quad \forall (x, y) \in \mathbb{R}^{2d} \quad \text{tal que} \quad \|x\| \leq L_M \quad \text{y} \quad \|y\| \leq L. \quad (2.50)$$

De (2.48), (2.49) y (2.50) concluimos que

$$\mathbf{K} = \{(x, y) \in \mathbb{R}^{2d} : \|x\| \leq L_M, \|y\| \leq L\}, \quad C = C(L) \quad \text{y} \quad \varepsilon \quad \text{es cualquier número} > 0. \quad (2.51)$$

Conclusión de la prueba: De la sección 2.1.2 tenemos el semigrupo $\{P_t(z, dz')\}_{t \geq 0}$ verifica la condición fuerte de Feller y de acuerdo con (2.8) y (2.22) se verifica que $\forall z \in \mathbb{R}^{2d}$ y para todo $O \subset \mathbb{R}^{2d}$ abierto y distinto del vacío :

$$R_z(z, O) = \int_0^\infty e^{-t} P_t(z, O) dt > 0 \quad (2.52)$$

La igualdad en (2.52) define al llamado operador resolvente R_λ para $\lambda = 1$, y la desigualdad implica la irreducibilidad del proceso de Markov $(Z_t)_{t \geq 0}$ que resuelve (2.2). Lo anterior garantiza que todo subconjunto compacto de \mathbb{R}^{2d} es un conjunto pequeño en el lenguaje de [39] y [21]. Esto completa las hipótesis el Teorema 5.2c en [39], podemos entonces aplicarlo y concluir así que la ergodicidad exponencial caracterizada en (2.26) es satisfecha.

2.2.2. Partícula en un potencial periódico

En este caso se considera $z = (x, y) \in \mathbb{T}^d \times \mathbb{R}^d$, donde \mathbb{T}^d denota el d -dimensional toro. Bajo las hipótesis \mathcal{H}_0 , \mathcal{H}_1 y la condición $V \geq 1$, es posible construir una función de Lyapunov (ver [38, Section 3]) que satisface (2.28). Para la construcción de esta función de Lyapunov se desarrolla un proceso similar al de la sección anterior con $\Psi(x, y) = \frac{\|y\|^2}{2} + V(x)$.

2.3. Inferencia estadística sobre los parámetros de una difusión hi-poelíptica.

De acuerdo con lo desarrollado en este capítulo, bajo \mathcal{H}_0 y \mathcal{H}_1 se consigue la existencia de una única solución para (2.2) que admite una única probabilidad invariante caracterizada en (2.22). También se

demostró que si adicionalmente se verifica \mathcal{H}_2 y (2.27), entonces la solución de (2.2) es exponencialmente ergódica. La unicidad y ergodicidad exponencial antes señalada son los principales ingredientes para demostrar que ciertos estimadores no paramétricos de la densidad invariante, el drift, el coeficiente de difusión y el gradiente del potencial correspondientes a (2.2), convergen al elemento que están estimando. Estos resultados asintóticos permiten medir la bondad de la estimación que hacen. Específicamente, se puede demostrar que partir de cualquier condición inicial $z_0 = (x_0, y_0)$ en (2.2):

- Para el estimador $\tilde{p}_s^\beta(x, y)$ de la densidad invariante $p_s^\beta(x, y)$, definido por:

$$\tilde{p}_s^\beta(x, y) := \frac{1}{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d} \sum_{i=l_n+1}^{l_n+n} K\left(\frac{x - X_{ih_n}}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_{ih_n}}{b_{2,n}}\right) \quad \text{con } K \in C_0^2. \quad (2.53)$$

se verifica la convergencia del tipo "Teorema Central del Límite",

$$\sqrt{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d} \left(\tilde{p}_s^\beta(x, y) - p_s^\beta(x, y) \right) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{D}} \mathcal{N}\left(0, p_s^\beta(x, y) \int K^2(s, t) ds dt \mathcal{F}\right). \quad (2.54)$$

- Para el estimador $\tilde{g}(x, y)$ del drift $g(x, y) = -(\nabla V(x)dt + \sigma^2(x)y)$ de la EDE en (2.2), definido por:

$$\tilde{g}_n = \frac{H_n}{\tilde{p}_s^\beta} \quad \text{con} \quad H_n(x, y) = \frac{1}{(n-1)b_{1,n}^d b_{2,n}^d} \sum_{i=l_n+1}^{l_n+n-1} K\left(\frac{x - X_{ih_n}}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_{ih_n}}{b_{2,n}}\right) \frac{Y_{(i+1)h_n} - Y_{ih_n}}{h_n} \quad (2.55)$$

se cumple que

$$\mathbb{E} \left(\frac{H_n}{\tilde{p}_s^\beta}(x, y) - g(x, y) \right)^2 = O\left(\frac{1}{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d h_n}\right). \quad (2.56)$$

- El estimador $-\langle \hat{g}_n(x, \mathbf{e}_i) - \hat{g}_n(x, 0), \mathbf{e}_j \rangle(x, y)$ converge en probabilidad \mathbb{P}^{z_0} a $\sigma_{ij}^2(x, y)$
- Para el estimador $\frac{\nabla_x \tilde{p}_s^\beta}{\tilde{p}_s^\beta}(x, y)$ de $-\beta \nabla V(x)$ se verifica la siguiente convergencia del tipo "Teorema Central del Límite",

$$\sqrt{nb_{1,n}^{(d+2)} b_{2,n}^d} \left(\frac{\nabla_x \tilde{p}_s^\beta}{\tilde{p}_s^\beta}(x, y) + \beta \nabla V(x) \right) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{D}} \mathcal{N}(0, \mathbf{L}(x, y)) \quad (2.57)$$

donde $\mathbf{L} = (l_{i,j}(x, y))_{1 \leq i, j \leq d}$ es una matriz diagonal definida por

$$l_{jj}(x, y) = \frac{1}{p_s^\beta(x, y)} \int (\partial_{x_j} K(u, v))^2 dudv.$$

A continuación serán demostradas las convergencias que se acaban de enunciar.

En el resto del capítulo K denotará una función de C^2 con soporte compacto en A para la cual se verifica que $\int_A K(x, y) dx dy = 1$, y se supondrá, sin pérdida de generalidad, que A es una bola acotada en \mathbb{R}^{2d} . Además se supondrá que existe un entero no negativo m tal que para todo polinomio no constante $P(x, y)$ de grado menor o igual a m se cumple que $\int P(u, v) K(u, v) dudv = 0$.

2.3.1. Estimación de la densidad invariante

Sea \tilde{p}_s^β definido en (2.53) un estimador para la densidad invariante p_s^β definida en (2.22). Esta sección está dedicada a la demostración de (2.54). Para esto será necesario usar dos resultados que se enuncian a continuación y cuyas pruebas pueden ser vistas en [10].

Proposición 2.3.1.1 *Si asumimos que \mathcal{H}_0 , \mathcal{H}_1 y \mathcal{H}_2 son satisfechas, entonces existe una constante $C > 0$ y $\rho > 0$ tal que : $\forall g, f \in \mathbb{L}^\infty(\mu), \forall t \geq 0$,*

$$|\text{Cov}_\mu(f(Z_t), g(Z_0))| \leq C \rho^{t/2} \left\| g - \int g d\mu \right\|_\infty \left\| f - \int f d\mu \right\|_\infty, \quad (2.58)$$

i.e., en regimen estacionario, $(Z_t, t \geq 0)$ es α -mixing con tasa de convergencia exponencial.

Teorema del limite central triangular.

Sean $(Z_{n,k})_{\{1 \leq k \leq k_n, n \in \mathbb{N}^*\}}$ una matriz triangular en \mathbb{R}^{2d} tal que la sucesión de enteros $k_n \uparrow \infty$ cuando $n \uparrow \infty$, y $S_n = Z_{n,1} + \dots + Z_{n,k_n}$, tal que para cada $n \in \mathbb{N}$, $(Z_{n,k})_{k \geq 1}$ es centrada y estacionaria, y supongamos que existe una matriz triangular de números reales positivos $(\alpha_n(j))_{n \in \mathbb{N}^*, 1 \leq j \leq k_n}$ tales que $\mathbb{E}(Z_{n,j} Z_{n,0}) \leq \alpha_n(j)$.

Sean también $S_{k,n} = Z_{n,1} + \dots + Z_{n,k}$ para $1 \leq k \leq k_n$ y $v_{n,k} = \text{Var } S_{k,n} - \text{Var } S_{k-1,n}$, tales que existe una constante γ tal que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \text{Var } S_n = \gamma^2 > 0 \quad (2.59)$$

y $\exists n_0 \in \mathbb{N}^*$ tal que $v_{n,k} > 0 \forall n \geq n_0, 1 \leq k \leq n$, respectivamente.

Finalmente, definimos

$$M_n = \sup_{1 \leq k \leq k_n} \|Z_{n,k}\|_\infty, \quad \delta_n = \sup_{1 \leq k \leq k_n} \mathbb{E}(|Z_{n,k}|) \text{ and for } k_n \geq j \geq 1 \quad \Delta_{n,j} = \mathbb{E}(|Z_{n,0} Z_{n,j}|). \quad (2.60)$$

Ahora es posible enunciar el Teorema del límite central triangular:

Teorema 2.3.1.2 *Sea $(Z_{n,k})_{1 \leq k \leq k_n}$ una matriz triangular que verifica (2.59). Si*

$$(k_n M_n + k_n^{\frac{2}{3}}) M_n \delta_n \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0, \quad (2.61)$$

$$k_n^{2/3} \sum_{j=1}^{k_n-1} \min(\alpha_n(j), \Delta_{n,j}) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0 \quad \text{y} \quad (1 + M_n) \sum_{j=1}^{k_n-1} (k_n - j) \min(\alpha_n(j), (\Delta_{n,j} + \delta_n^2)) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0, \quad (2.62)$$

$$\text{entonces:} \quad S_n \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{D}} \mathcal{N}(0, \gamma^2). \quad (2.63)$$

Ahora estamos listos para enunciar y demostrar el teorema central del límite para la densidad invariante de un proceso que satisface (2.2).

Distribución inicial con densidad p_s^β .

Teorema 2.3.1.3 *Supongamos que \mathcal{H}_0 , \mathcal{H}_1 y \mathcal{H}_2 se cumplen y consideremos el estimador \tilde{p}_s de p_s^β definido por:*

$$\tilde{p}_s(x, y) := \frac{1}{n b_{1,n}^d b_{2,n}^d} \sum_{i=1}^n K\left(\frac{x - X_{ih_n}}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_{ih_n}}{b_{2,n}}\right) \quad \text{con } K \in C_0^2. \quad (2.64)$$

Si los parámetros $b_{1,n}$, $b_{2,n}$ y h_n de \tilde{p}_s satisfacen las siguientes propiedades:

- (i) $b_{1,n}, b_{2,n}$ y $h_n \rightarrow 0$,
- (ii) $n b_{1,n}^d b_{2,n}^d \rightarrow +\infty$,
- (iii) $\frac{b_{1,n} b_{2,n}}{h_n^2} \rightarrow 0$,
- (iv) Existe un entero $m > 0$ tal que $n b_{1,n}^d b_{2,n}^d \max(b_{1,n}, b_{2,n})^{2(m+1)} \rightarrow 0$.

Entonces,

$$\sqrt{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d} (\bar{p}_s(x, y) - p_s^\beta(x, y)) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{D}} \mathcal{N} \left(0, p_s^\beta(x, y) \int K^2(s, t) ds dt \right), \quad (2.65)$$

siempre que p_s^β sea la distribución inicial de la solución de (2.2).

Demostración 6 La demostración se hará en dos partes. Específicamente, como

$$\sqrt{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d} (\bar{p}_s - p_s^\beta) = \underbrace{\sqrt{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d} (\bar{p}_s - \mathbb{E}(\bar{p}_s))}_{\text{Error estocástico}} + \underbrace{\sqrt{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d} (\mathbb{E}(\bar{p}_s) - p_s^\beta)}_{\text{sesgo determinístico}},$$

primero se demostrará que el sesgo converge en distribución a una Gaussiana:

$$\sqrt{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d} (\bar{p}_s(x, y) - \mathbb{E}\bar{p}_s(x, y)) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{D}} \mathcal{N} \left(0, p_s^\beta(x, y) \int \int K^2(s, t) ds dt \right), \quad (2.66)$$

y luego se demostrará que el error estocástico converge en distribución a cero:

$$\sqrt{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d} (\mathbb{E}(\bar{p}_s(x, y)) - p_s^\beta(x, y)) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{D}} 0. \quad (2.67)$$

ya que bajo estas condiciones el Teorema de Slutsky ([32], page 146), garantiza (2.65).

■ **Término estocástico:**

Esta parte se demostrará usando el teorema 2.3.1.2. Para ello se definirá el proceso triangular de interés asociado a \bar{p}_s , se verificará que son satisfechas las hipótesis de este teorema para $k_n, M_n, \delta_n, \alpha_n$ y $v_{n,j}$ como fueron definidos en su introducción y finalmente bajo esta construcción su conclusión será (2.66)

Sea (X_{jh_n}, Y_{jh_n}) , $j = 1, \dots, n$ la discretización de la solución $(Z_t, t \geq 0)$ de (2.2). Por simplicidad y sin pérdida de generalidad, en lo que sigue escribiremos h en lugar de h_n y consideraremos $k_n = n$. Sea $Z_{n,j}$ definido por:

$$Z_{n,j} = \frac{1}{\sqrt{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d}} \left(K \left(\frac{x - X_{jh}}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_{jh}}{b_{2,n}} \right) - \mathbb{E} K \left(\frac{x - X_0}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_0}{b_{2,n}} \right) \right). \quad (2.68)$$

Como en esta parte la distribución de Z_0 es la densidad invariante p_s^β , se tiene que, de acuerdo con la observación 1.1.0.9, el proceso $(Z_t)_t$ es estacionario. Entonces, por definición (2.68), para cada n se tiene que $(Z_{n,j})_j$ es centrado y estacionario. A continuación serán acotados M_n, δ_n, α_n y $v_{n,k}$.

Debido a que $(Z_{n,j})_j$ es estacionario y centrado, y que el kernel K es acotado se tiene que:

$$M_n = \mathcal{O} \left(\frac{1}{\sqrt{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d}} \right) \quad \text{y} \quad \alpha_n(j) = \mathbb{E}(Z_{n,j} Z_{n,0}) = \mathcal{O} \left(M_n^2 \rho^{(jh_n)/2} \right). \quad (2.69)$$

Para concluir la identidad a la derecha de (2.69) se usa que las hipótesis del capítulo y la acotación de K son suficientes para (2.58). Lo anterior y la hipótesis (ii) garantizan que

$$M_n \rightarrow 0 \quad \text{y en consecuencia, que } \alpha_n(j) \rightarrow 0, \quad \text{cuando } n \rightarrow \infty. \quad (2.70)$$

Nuevamente usando que $(Z_{n,j})_j$ es centrada y estacionario, y adicionalmente haciendo un cambio de variable conveniente, de la definición de δ_n se consigue que

$$\begin{aligned} \delta_n &= \sup_{j \leq n} \mathbb{E}(|Z_{n,j}|) \leq 2 \frac{1}{\sqrt{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d}} \mathbb{E} K \left(\frac{x - X_0}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_0}{b_{2,n}} \right) \\ &\leq \frac{2}{\sqrt{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d}} \int K \left(\frac{x - u}{b_{1,n}}, \frac{y - v}{b_{2,n}} \right) p_s(u, v) \, du \, dv \\ &\leq \frac{2b_{1,n}^{d/2} b_{2,n}^{d/2}}{\sqrt{n}} \int_A K(u, v) p_s(b_{1,n}(x - u), b_{2,n}(y - v)) \, du \, dv. \end{aligned} \quad (2.71)$$

Se puede observar que, si $(u, v) \in A$ and $b_{i,n} \leq 1$ para $i = 1, 2$, entonces $(b_{1,n}(x - u), b_{2,n}(y - v)) \in (x, y) - A$ que es un conjunto acotado porque A lo es. Entonces p_s^β es acotada en $(x, y) - A$, y esto, usando que K es acotada, garantiza que

$$\delta_n = \mathcal{O} \left(\frac{b_{1,n}^{d/2} b_{2,n}^{d/2}}{\sqrt{n}} \right). \quad (2.72)$$

Por la definición de Δ_n , su proceso de acotación es análogo al de δ_n . Se obtiene entonces lo siguiente

$$\Delta_{n,j} \leq 3\delta_n^2 + A_{n,j}, \quad \text{donde} \quad (2.73)$$

$$A_{n,j} = \frac{1}{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d} \int K \left(\frac{x - u}{b_{1,n}}, \frac{y - v}{b_{2,n}} \right) K \left(\frac{x - u'}{b_{1,n}}, \frac{y - v'}{b_{2,n}} \right) p_s(u, v) p_{jh}((u, v), (u', v')) \, du' \, dv' \, du \, dv.$$

Luego, usando el mismo cambio de variable que en (2.71), el mismo argumento de compacidad y el Teorema 2.1 in [33] se obtiene que para constantes positivas

$$A_{n,j} \leq \frac{C}{n} \left(b_{1,n}^d b_{2,n}^d \left(\frac{1}{(jh)^{2d}} + e^{-D/jh} \right) \right) \leq \frac{C}{n} \left(b_{1,n}^d b_{2,n}^d \left(\frac{1}{(jh)^{2d}} + 1 \right) \right) \quad (2.74)$$

También, la caracterización estándar de la varianza de una suma en función de las varianzas y covarianzas asociadas a sus términos y la estacionariedad de $(Z_{n,j})_j$, implican que

$$v_{n,k} \geq \text{Var}(Z_{n,k}) - 2 \sum_{j=1}^{k-1} \min(\alpha_n(k - j), \Delta_{n,k-j}). \quad (2.75)$$

Usando propiedades del mínimo y las desigualdades (2.69), (2.72) y (2.74) se consigue que

$$n \sum_{j=1}^{n-1} \min(\alpha_n(j), \Delta_{n,j}) \leq \sum_{j=1}^{n-1} \min \left(\frac{\rho^{jh/2}}{b_{1,n}^d b_{2,n}^d}, C_1 b_{1,n}^d b_{2,n}^d \left(\frac{1}{(jh)^{2d}} + 1 \right) \right) \quad (2.76)$$

$$\text{y} \quad \sum_{j=1}^{n-1} (n - j) \min(\alpha_n(j), \Delta_{n,j} + \delta_n^2) \leq \sum_{j=1}^{n-1} \min \left(\frac{\rho^{jh/2}}{b_{1,n}^d b_{2,n}^d}, C_2 b_{1,n}^d b_{2,n}^d \left(\frac{1}{(jh)^{2d}} + 1 \right) \right), \quad (2.77)$$

donde C_1 y C_2 son constantes conveniente.

Ahora bien, de acuerdo con (2.69) y (2.72),

$$(nM_n + n^{\frac{2}{3}})M_n = \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sqrt{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d}} + \frac{1}{n^{\frac{1}{3}}}\right),$$

y esto garantiza, por (i), que

$$(nM_n + n^{\frac{2}{3}})M_n \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0 \quad (2.78)$$

Si demostramos que se cumple

$$\sum_{j=1}^{n-1} \min\left(\frac{\rho^{jh/2}}{b_{1,n}^d b_{2,n}^d}, Cb_{1,n}^d b_{2,n}^d \left(\frac{1}{(jh)^{2d}} + 1\right)\right) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0, \quad (2.79)$$

por (2.76) se verificará que

$$n \sum_{j=1}^n \min(\alpha_n(j), \Delta_{n,j}) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0 \quad \text{y} \quad \sum_{j=1}^{n-1} (n-j) \min(\alpha_n(j), \Delta_{n,j} + \delta_n^2) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0, \quad (2.80)$$

entonces, de acuerdo con (2.75) y (2.70) se verifica que $\exists n_0 \in \mathbb{N}^*$ tal que $v_{n,k} > 0 \forall n \geq n_0, 1 \leq k \leq n$, respectivamente, y se verifica (2.62).

Definamos ahora

$$\bar{p}_s(x, y) := \frac{1}{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d} \sum_{i=1}^n K\left(\frac{x - X_{ih}}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_{ih}}{b_{2,n}}\right).$$

Por el desarrollo previo, aplicando el Teorema 2.3.1.2 se obtiene (2.66):

$$\sqrt{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d} (\bar{p}_s(x, y) - \mathbb{E}\bar{p}_s(x, y)) \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} \mathcal{N}\left(0, p_s^\beta(x, y) \int \int K^2(s, t) ds dt\right),$$

siempre que

(1) $M_n \rightarrow 0$, cuando $n \rightarrow +\infty$,

(2) $\sum_{j=1}^{n-1} \min\left(\frac{\rho^{jh/2}}{b_{1,n}^d b_{2,n}^d}, Cb_{1,n}^d b_{2,n}^d \left(\frac{1}{(jh)^{2d}} + 1\right)\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$, para una constante conveniente C .

El ítem (1) se verificó en (2.70) y (2) será demostrado a continuación

Como $\min(a, b + c) \leq \min(a, b) + \min(a, c)$, se tiene que

$$\sum_{j=1}^{n-1} \frac{\rho^{jh/2}}{b_{1,n}^d b_{2,n}^d} \wedge Cb_{1,n}^d b_{2,n}^d \left(\frac{1}{(jh)^{2d}} + 1\right) \leq \frac{Cb_{1,n}^d b_{2,n}^d}{h^{2d}} \sum_{j=1}^{n-1} \frac{1}{j^2} + \sum_{j=1}^{n-1} \frac{\rho^{jh/2}}{b_{1,n}^d b_{2,n}^d} \wedge Cb_{1,n}^d b_{2,n}^d.$$

Como por hipótesis iii) se cumple, entonces el primer término a la derecha tiende a 0, y para el segundo, se define $j_n = h^{-2d}$ y usando nuevamente iii) se consigue que $b_{1,n} b_{2,n} \leq C' h_n^2$ y en consecuencia

lo siguiente,

$$\begin{aligned}
\sum_{j=1}^{n-1} \frac{\rho^{jh_n/2}}{b_{1,n}^d b_{2,n}^d} \wedge C b_{1,n}^d b_{2,n}^d &\leq C b_{1,n}^d b_{2,n}^d j_n + \sum_{j=j_n}^{n-1} \frac{\rho^{jh_n/2}}{b_{1,n}^d b_{2,n}^d} \\
&\leq \frac{C b_{1,n}^d b_{2,n}^d}{h_n^{2d}} + \frac{\rho^{j_n h_n/2}}{b_{1,n}^d b_{2,n}^d (1 - \rho^{h_n/2})} \\
&\leq \frac{C b_{1,n}^d b_{2,n}^d}{h_n^{2d}} + \frac{2 \rho^{j_n h_n/2}}{b_{1,n}^d b_{2,n}^d h_n \log(1/\rho)} \\
&\leq \frac{C b_{1,n}^d b_{2,n}^d}{h_n^{2d}} + \frac{2C' \exp\left(-\log(1/\rho) \frac{C'}{b_{1,n}^{d-\frac{1}{2}} b_{2,n}^{d-\frac{1}{2}}}\right)}{b_{1,n}^{d+\frac{1}{2}} b_{2,n}^{d+\frac{1}{2}} \log(1/\rho)}.
\end{aligned}$$

Esta cadena de desigualdades concluye esta prueba porque ambos términos a la derecha de la última desigualdad tienden a 0 cuando $n \rightarrow +\infty$ debido a que $b_{i,n} \rightarrow 0$ y $\rho < 1$.

■ **Sesgo:**

Ahora consideramos el sesgo asociado al estimador en estudio

$$B_n = \sqrt{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d} |\mathbb{E}(\bar{p}_s(x, y)) - p_s^\beta(x, y)|.$$

A partir de la definición de esperanza y luego haciendo un cambio de variable, se puede reescribir B_n como sigue,

$$\begin{aligned}
B_n &= \sqrt{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d} \int \frac{1}{b_{1,n}^d b_{2,n}^d} K\left(\frac{x-u}{b_{1,n}}, \frac{y-v}{b_{2,n}}\right) (p_s^\beta(u, v) - p_s^\beta(x, y)) du dv \\
&= \sqrt{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d} \int K(u, v) \left(p_s^\beta(x - b_{1,n}u, y - b_{2,n}v) - p_s^\beta(x, y)\right) du dv. \quad (2.81)
\end{aligned}$$

para conseguir que (2.81) tiende a 0, se considera el desarrollo de Taylor y se usa el teorema de convergencia dominada. También se usan las hipótesis de K : existe $m \in \mathbb{N}^*$ tal que para todo polinomio $P(x, y)$ con grado menor o igual a m , $\int P(u, v)K(u, v)du dv = 0$, e $i v$) en el enunciado del Teorema.

■

Distribución inicial concentrada en el punto z_0 .

Teorema 2.3.1.4 Asumiendo que $\mathcal{H}_0, \mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ y las hipótesis (i)-(iv) del Teorema 2.3.1.3 son satisfechas, y que l_n en (2.53) verifica que (v) $l_n h_n \rightarrow +\infty$, entonces, a partir de cualquier condición inicial $z_0 = (x_0, y_0) \in \mathbb{R}^{2d}$, para el estimador \bar{p}_s^β definido en (2.53) se verifica que,

$$\sqrt{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d} \left(\bar{p}_s^\beta(x, y) - p_s^\beta(x, y)\right) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{D}} \mathcal{N}\left(0, p_s^\beta(x, y) \int K^2(s, t) ds dt \mathcal{I}\right). \quad (2.82)$$

Observación 2.3.1.5 En particular, si $h_n = n^{-\gamma}$, $b_{i,n} = n^{-\alpha_i}$, $i = 1, 2$ con $\gamma, \alpha_1, \alpha_2 > 0$, entonces la hipótesis (i)-(iv) son equivalentes a

$$\gamma < \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{2} < \frac{1}{2d} \quad y \quad m > \frac{1 - (\alpha_1 + \alpha_2)d}{2(\alpha_1 \wedge \alpha_2)} \quad (2.83)$$

Demostración 7 Como

$$\sqrt{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d}(\bar{p}_s - p_s^\beta) = \sqrt{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d}(\bar{p}_s - \tilde{p}_s^\beta) + \sqrt{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d}(\tilde{p}_s^\beta - p_s^\beta), \quad (2.84)$$

es suficiente demostrar que

$$\sqrt{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d}(\bar{p}_s - \tilde{p}_s^\beta) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{\mathcal{D}} 0 \quad (2.85)$$

porque el Teorema 2.3.1.3 garantiza que el término a la izquierda de la identidad en (2.84) converge en distribución a una $\mathcal{N}\left(0, p_s^\beta(x, y) \int K^2(s, t) ds dt \mathcal{I}\right)$. Bajo estas condiciones, si aplicamos el Teorema de Slutsky ([32], page 146), conseguimos (2.82).

Para demostrar (2.85) es suficiente probar que para $h \in \mathcal{C}_b(\mathbb{R})$, la diferencia

$$\begin{aligned} \Delta_n(h) &= \mathbb{E}\left[h\left(\sqrt{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d} \bar{p}_s(x, y) | Z_0 \sim \mu\right) - h\left(\sqrt{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d} \tilde{p}_s^\beta(x, y) | Z_0 = z_0\right)\right] \\ &= \mathbb{E}\left[h\left(\sqrt{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d} \tilde{p}_s^\beta(x, y) | Z_0 \sim \mu\right) - h\left(\sqrt{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d} \tilde{p}_s^\beta(x, y) | Z_0 = z_0\right)\right] \\ &\xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} 0 \end{aligned} \quad (2.86)$$

donde $\mu(dz) = p_s^\beta(z) dz$. Entonces, sea $h \in \mathcal{C}_b(\mathbb{R})$ y denotemos $\theta = \|h\|_\infty$.

Para evaluar $\mathbb{E}(h(\bar{p}_n(x, y)) | Z_0 \sim \mu) - \mathbb{E}(h(\bar{p}_n(x, y)) | Z_0 = z_0)$ se fija $n \in \mathbb{N}^*$ y se calcula la esperanza condicional con respecto a Z_{jh_n} , $j \geq l_n + 2$.

Sea $h_{Z_{jh_n}, j \geq l_n + 2}(z')$ definido por

$$h_{Z_{jh_n}, j \geq l_n + 2}(z') = h \left(\frac{1}{\sqrt{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d}} \left[K\left(\frac{x-x'}{b_{1,n}}, \frac{y-y'}{b_{2,n}}\right) + \sum_{i=l_n+2}^{l_n+n} K\left(\frac{x-X_{ih_n}}{b_{1,n}}, \frac{y-Y_{ih_n}}{b_{2,n}}\right) \right] \right).$$

Ahora tomando esperanza condicional con respecto a Z_{jh_n} , $j \geq l + 2$, conseguimos :

$$\begin{aligned} |\mathbb{E}(h(\bar{p}_n(x, y)) | Z_0 \sim \mu) - \mathbb{E}(h(\bar{p}_n(x, y)) | Z_0 = z_0)| &= \left| \int h_{Z_{jh_n}, j \geq l_n + 2}(z') (p_s(z') - q_{(l_n+1)h_n}(z_0, z')) dz' \right| \\ &\leq \theta D \rho^{(l_n+1)h_n} \Psi(z_0) \end{aligned} \quad (2.87)$$

donde la última desigualdad es equivalente a \mathcal{H}_2 . En (2.87), D es constante, Ψ es una función a valores reales no negativos y $0 < \rho < 1$. Ya que $0 < \rho < 1$, usando (iv) podemos concluir que $\Delta_n(h) \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} +0$. ■

Observación 2.3.1.6 En las próximas secciones de este capítulo, será necesario usar convergencia en probabilidad de $\tilde{p}_s^\beta(x, y)$ a p_s^β para aplicar el Teorema de Slutsky. A partir de desigualdades de covarianzas demostradas en [52] para sucesiones β -mixing (ver sección 1.2) se consigue que

$$\sqrt{nh_n b_{1,n}^d b_{2,n}^d}(\tilde{p}_s^\beta(x, y) - p_s^\beta(x, y)) = O_{\mathbb{P}}(1), \quad (2.88)$$

donde $O_{\mathbb{P}}(1)$ significa acotación estocástica, siempre que (i) – (ii), (iv) – (v) en el Teorema 2.3.1.4 son satisfechas.

2.3.2. Estimación del Drift.

Sea \tilde{g} definido en (3.3) un estimador no paramétrico del drift $g(x, y) = -(\nabla V(x) dt + \sigma^2(x) y)$ de la EDE en (2.2). Esta sección está dedicada a la demostración de (2.89). Para esto será necesario usar algunos resultados demostrados en [11].

Observación 2.3.2.1 De la relación de fluctuación-disipación que caracteriza el sistema en (2.2), se deriva la forma analítica en (2.22) para la densidad estacionaria p_s^β . A partir de esta fórmula se puede demostrar que el drift $g(x, y) = -(\nabla V(x)dt + \sigma^2(x)y)$ de la EDE en (2.2), pertenece al dominio de su generador infinitesimal, dado en (2.18), para todo $L^\gamma(\mu)$, for $1 \leq \gamma < +\infty$ siempre que el potencial V y su gradiente tengan crecimiento polinomial cuando $x \rightarrow \infty$.

Teorema 2.3.2.2 Supongamos que las hipótesis \mathcal{H}_0 , \mathcal{H}_1 and \mathcal{H}_2 son satisfechas y que

(i) $b_{1,n}, b_{2,n}$ y $h_n \rightarrow 0$,

(ii') $n h_n b_{1,n}^d b_{2,n}^d \rightarrow +\infty$,

(iii) $\exists p > 1$ tal que $\frac{h_n}{(b_{1,n} b_{2,n})^{d(2-\frac{1}{p})}} \xrightarrow{n \rightarrow +\infty} 0$,

(iv) $\exists m \in \mathbb{N}^*$ tal que $n b_{1,n}^d b_{2,n}^d \max(b_{1,n}, b_{2,n})^{2(m+1)} \rightarrow 0$,

(v) $l_n h_n \rightarrow +\infty$

(vi) El drift g correspondiente al sistema en (2.2) pertenece al dominio del generador infinitesimal \mathcal{L} , para todo $L^\gamma(\mu)$, con $1 \leq \gamma < +\infty$.

Entonces, a partir de cualquier condición inicial $z_0 = (x_0, y_0)$ para el sistema en (2.2), se verifica que :

$$\mathbb{E} \left(\frac{H_n}{\bar{p}_s^\beta}(x, y) - g(x, y) \right)^2 = O \left(\frac{1}{n b_{1,n}^d b_{2,n}^d h_n} \right). \quad (2.89)$$

Demostración 8 Análogo a lo hecho en la sección anterior, para demostrar (2.89) primero se considerará el caso estacionario y luego el correspondiente a la distribución inicial puntual, es decir, primero se considerará $(X_0, Y_0) \sim p_s^\beta(z) dz$ con $p_s^\beta(z)$ descrito en (2.22), and $l_n \equiv 0$ en (2.53) y (3.3):

$$H_n(x, y) = \frac{1}{(n-1) b_{1,n}^d b_{2,n}^d} \sum_{i=1}^{n-1} K \left(\frac{x - X_{ih_n}}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_{ih_n}}{b_{2,n}} \right) \frac{Y_{(i+1)h_n} - Y_{ih_n}}{h_n}, \quad y$$

$$\bar{p}_s(x, y) := \frac{1}{n b_{1,n}^d b_{2,n}^d} \sum_{i=1}^n K \left(\frac{x - X_{ih_n}}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_{ih_n}}{b_{2,n}} \right),$$

y luego se considera el caso en que $z_0 = (x_0, y_0)$ cuya prueba formal se encuentra en [11, Theorem 5.1].

$$\bar{p}_s(x, y) := \frac{1}{n b_{1,n}^d b_{2,n}^d} \sum_{i=1}^n K \left(\frac{x - X_{ih_n}}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_{ih_n}}{b_{2,n}} \right) \quad \text{con } K \in C_0^2. \quad (2.90)$$

Regimen Estacionario

Paso 1: primero probaremos que

$$\mathbb{E}[H_n(x, y)] \xrightarrow{n \rightarrow \infty} g(x, y) p_s^\beta(x, y). \quad (2.91)$$

Para ello se define la sucesión auxiliar $(\hat{H}_n(x, y))_n$ como sigue

$$\hat{H}_n(x, y) = \frac{1}{(n-1)b_{1,n}^d b_{2,n}^d} \sum_{i=1}^{n-1} K\left(\frac{x - X_{ih_n}}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_{ih_n}}{b_{2,n}}\right) \frac{\sigma(X_{ih_n})(W_{(i+1)h_n} - W_{ih_n}) + \int_{ih_n}^{(i+1)h_n} g(X_t, Y_t) dt}{h_n}.$$

Entonces, de acuerdo con la forma integral de la EDE en (2.2), se tiene que:

$$(n-1)h_n b_{1,n}^d b_{2,n}^d (\mathbf{H}_n(x, y) - \hat{H}_n(x, y)) = \sum_{i=1}^{n-1} K\left(\frac{x - X_{ih_n}}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_{ih_n}}{b_{2,n}}\right) \int_{ih_n}^{(i+1)h_n} [\sigma(X_t) - \sigma(X_{ih_n})] dB_t. \quad (2.92)$$

Recordemos que $\|\cdot\|$ denota la norma euclídea en \mathbb{R}^d . Entonces, aplicando la isometría de Itô a (2.92), se obtiene la desigualdad

$$h_n^2 (n-1)^2 b_{1,n}^{2d} b_{2,n}^{2d} \mathbb{E} \|\mathbf{H}_n(x, y) - \hat{H}_n(x, y)\|^2 \leq \sum_{i=1}^{n-1} \mathbb{E} \left(K^2\left(\frac{x - X_{ih_n}}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_{ih_n}}{b_{2,n}}\right) \int_{ih_n}^{(i+1)h_n} \text{Tra}((\sigma(X_t) - \sigma(X_{ih_n}))^2) dt \right). \quad (2.93)$$

Entonces, como la primera derivada de σ es uniformemente acotada, se deduce de (2.93) y de la fórmula de Taylor de orden uno que:

$$\mathbb{E} \|\mathbf{H}_n(x, y) - \hat{H}_n(x, y)\|^2 = O\left(\frac{h_n}{(n-1)b_{1,n}^d b_{2,n}^d}\right). \quad (2.94)$$

Se define ahora la nueva sucesión $(\tilde{H}_n(x, y))_n$ como sigue

$$\tilde{H}_n(x, y) = \frac{1}{(n-1)b_{1,n}^d b_{2,n}^d} \sum_{i=1}^{n-1} K\left(\frac{x - X_{ih_n}}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_{ih_n}}{b_{2,n}}\right) \left(\frac{\sigma(X_{ih_n})(W_{(i+1)h_n} - W_{ih_n})}{h_n} + g(X_{ih_n}, Y_{ih_n}) \right). \quad (2.95)$$

Entonces

$$(n-1)h_n b_{1,n}^d b_{2,n}^d (\hat{H}_n(x, y) - \tilde{H}_n(x, y)) = \sum_{i=1}^{n-1} K\left(\frac{x - X_{ih_n}}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_{ih_n}}{b_{2,n}}\right) \int_{ih_n}^{(i+1)h_n} (g(X_t, Y_t) dt - g(X_{ih_n}, Y_{ih_n})) dt.$$

Si P_t denota el semigrupo asociado al proceso de Markov Z_t que resuelve (2.2) y para $k \in \{1, \dots, n\}$ usamos el super índice k para identificar la k -ésima coordenada del vector con el que se está operando, obtenemos lo siguiente:

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left(\hat{H}_n^k(x, y) - \tilde{H}_n^k(x, y) \right) &= \frac{1}{b_{1,n}^d b_{2,n}^d} \int K\left(\frac{x-u}{b_{1,n}}, \frac{y-v}{b_{2,n}}\right) \frac{1}{h_n} \int_0^{h_n} \left(P_t(g^k)(u, v) - g^k(u, v) \right) dt \\ &= \frac{1}{b_{1,n}^d b_{2,n}^d} \int K\left(\frac{x-u}{b_{1,n}}, \frac{y-v}{b_{2,n}}\right) \frac{1}{h_n} \int_0^{h_n} \left(P_t(g^k)(u, v) - g^k(u, v) \right) dt p_s^\beta(u, v) du dv \\ &= \int K(u_1, v_1) du_1 dv_1 \times \\ &\quad \int_0^{h_n} \frac{t}{h_n} \left(\frac{(P_t - I)(g^k)}{t}(x - b_{1,n}u_1, y - b_{2,n}v_1) \right) dt p_s^\beta(x - b_{1,n}u_1, y - b_{2,n}v_1) \\ &= o(h_n). \end{aligned} \quad (2.96)$$

donde la primera identidad se debe a la estacionaridad de $(Z_t)_{\{t \geq 0\}}$, la segunda se obtiene haciendo un cambio de variable y reescribiendo convenientemente en función de la definición del generador infinitesimal. La última identidad se debe a (vi) lo cual permite la aplicación del teorema de la convergencia

dominada. La condición (vi) se verifica porque se asumen las hipótesis en la observación 2.3.2.1 lo cual, junto a la definición de p_s^β , es suficiente para (vi).

Además, de acuerdo con el hecho de que la esperanza de una integral de Itô es cero, los términos de (2.95) que tienen como factor a dB_{ih} se anulan, y aplicando (vi) nuevamente es posible aplicar el Teorema de la convergencia dominada y concluir lo siguiente,

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[\tilde{H}_n(x, y)] &= \int K(u_1, v_1) g(x - b_{1,n}u_1, y - b_{2,n}v_1) p_s^\beta(x - b_{1,n}u_1, y - b_{2,n}v_1) du_1 dv_1 \\ &\xrightarrow{n \rightarrow \infty} g(x, y) p_s^\beta(x, y) \end{aligned} \quad (2.97)$$

Entonces, de (2.94), (2.96) and (2.97) se consigue (2.91).

Paso 2: Este paso está dedicado al estudio de $\mathbb{E}(\hat{H}_n(x, y) - \tilde{H}_n(x, y))^2$. Se define:

$$\mathcal{B}_n(i) = \frac{1}{h_n} \int_{ih_n}^{(i+1)h_n} (g(X_t, Y_t) dt - g(X_{ih_n}, Y_{ih_n})) dt.$$

Y en función de esta definición se define $\hat{H}_n(x, y) - \tilde{H}_n(x, y)$ como sigue:

$$\hat{H}_n(x, y) - \tilde{H}_n(x, y) = \frac{1}{(n-1)b_{1,n}^d b_{2,n}^d} \sum_{i=1}^{n-1} K\left(\frac{x - X_{ih_n}}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_{ih_n}}{b_{2,n}}\right) \mathcal{B}_n(i).$$

La desigualdad anterior puede ser escrita coordenada a coordenada como sigue:

$$\hat{H}_n^k(x, y) - \tilde{H}_n^k(x, y) = \frac{1}{(n-1)b_{1,n}^d b_{2,n}^d} \sum_{i=1}^{n-1} K\left(\frac{x - X_{ih_n}}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_{ih_n}}{b_{2,n}}\right) \mathcal{B}_n^k(i). \quad (2.98)$$

Luego, aplicando la caracterización estándar de la varianza de una suma en función de las varianzas y covarianzas asociadas a sus términos en la suma de la derecha de la igualdad en (2.98) implican que

$$\begin{aligned} \text{Var}\left((n-1)b_{1,n}^d b_{2,n}^d (\hat{H}_n^k(x, y) - \tilde{H}_n^k(x, y))\right) &= \sum_{i=1}^{n-1} \text{Var}\left(K\left(\frac{x - X_{ih_n}}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_{ih_n}}{b_{2,n}}\right) \mathcal{B}_n^k(i)\right) \\ &+ \sum_{1 \leq i \neq l \leq n-1} \text{Cov}\left(K\left(\frac{x - X_{ih_n}}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_{ih_n}}{b_{2,n}}\right) \mathcal{B}_n^k(i), K\left(\frac{x - X_{lh_n}}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_{lh_n}}{b_{2,n}}\right) \mathcal{B}_n^k(l)\right). \end{aligned}$$

Para acotar el primer término a la derecha en la identidad anterior:

$$\sum_{i=1}^{n-1} \text{Var}\left(K\left(\frac{x - X_{ih_n}}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_{ih_n}}{b_{2,n}}\right) \mathcal{B}_n^k(i)\right) \quad (2.99)$$

es necesario acotar el segundo momento y el cuadrado del primer momento. La acotación del segundo momento sigue a continuación. Por estacionaridad se consigue

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{n-1} \mathbb{E}\left[\left(K\left(\frac{x - X_{ih_n}}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_{ih_n}}{b_{2,n}}\right) \mathcal{B}_n^k(i)\right)^2\right] &= (n-1) \mathbb{E}\left[\left(K\left(\frac{x - X_0}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_0}{b_{2,n}}\right) \mathcal{B}_n^k(0)\right)^2\right] \\ &\leq (n-1) \frac{1}{h_n^2} \int_0^{h_n} t^2 \int K^2\left(\frac{x - u}{b_{1,n}}, \frac{y - v}{b_{2,n}}\right) \left(\frac{P_t(g^k)(u, v) - g^k(u, v)}{t}\right)^2 \times \\ &\quad p_s^\beta(u, v) du dv dt \\ &= O\left((n-1)h_n b_{1,n}^{d/p} b_{2,n}^{d/p}\right). \end{aligned} \quad (2.100)$$

La última cota se obtiene aplicando desigualdad de Hölder con componentes conjugados p y q . También, se usa que $\left(\frac{P_t(g^k)(u,v) - g^k(u,v)}{t}\right)$ es acotado en $\mathbb{L}^{2q}(p_s^\beta(u,v) du dv)$ por hipótesis (vi).

El cuadrado del primer momento se acota usando la desigualdad de Cauchy-Schwarz, (2.100) e (iv) en las hipótesis del teorema que estamos probando (procedimiento es detallado en el apéndice de [11], página 14),

$$\left(\mathbb{E} \hat{H}_n^k(x, y) - \mathbb{E} \tilde{H}_n^k(x, y)\right)^2 = O\left(h_n b_{1,n}^{\frac{d}{p}-2d} b_{2,n}^{\frac{d}{p}-2d}\right). \quad (2.101)$$

Para acotar el término de covarianzas:

$$\sum_{1 \leq i \neq l \leq n-1} \text{Cov}\left(K\left(\frac{x - X_{ih_n}}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_{ih_n}}{b_{2,n}}\right) \mathcal{B}_n^k(i), K\left(\frac{x - X_{lh_n}}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_{lh_n}}{b_{2,n}}\right) \mathcal{B}_n^k(l)\right),$$

se usa la desigualdad de covarianza (2.58), que puede ser aplicada porque de acuerdo con las hipótesis asumidas en esta sección \mathcal{H}_1 , \mathcal{H}_0 y \mathcal{H}_2 el proceso (Z_t) es β -mixing (ver (2.26)). A continuación C denota una constante positiva que puede variar de línea a línea.

Sean $r, p \in \mathbb{N}^*$. Entonces, se consigue lo siguiente:

$$\begin{aligned} \sum_{i \neq l} \text{Cov}\left(K\left(\frac{x - X_{ih_n}}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_{ih_n}}{b_{2,n}}\right) \mathcal{B}_n^k(i), K\left(\frac{x - X_{lh_n}}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_{lh_n}}{b_{2,n}}\right) \mathcal{B}_n^k(l)\right) \\ \leq Cn \sum_{j=1}^{n-2} \min\left(\left(b_{1,n}^d b_{2,n}^d\right)^{1-\frac{1}{r}} e^{-\frac{j h_n \lambda}{r}}, \text{Var}\left(K\left(\frac{x - X_0}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_0}{b_{2,n}}\right) \mathcal{B}_n^k(0)\right)\right) \\ \leq Cn \sum_{j=1}^{n-2} \min\left(\left(b_{1,n}^d b_{2,n}^d\right)^{1-\frac{1}{r}} e^{-\frac{j h_n \lambda}{r}}, \left(b_{1,n}^d b_{2,n}^d\right)^{\frac{1}{p}} h_n\right) = O\left(n (b_{1,n} b_{2,n})^{\frac{d}{p}}\right), \end{aligned}$$

donde r, p son tales que $\frac{1}{r} + \frac{1}{p} = 1$,

Sumando los términos de varianza y covarianza se obtiene lo siguiente:

$$\text{Var}(\hat{H}_n^k(x, y) - \tilde{H}_n^k(x, y)) = O\left(n^{-1} (b_{1,n} b_{2,n})^{\frac{d}{p}-2d}\right). \quad (2.102)$$

Entonces, se puede deducir de (2.102) y (2.101) que,

$$\mathbb{E}\left(\hat{H}_n^k(x, y) - \tilde{H}_n^k(x, y)\right)^2 = O\left(h_n (b_{1,n} b_{2,n})^{\frac{d}{p}-2d}\right). \quad (2.103)$$

Paso 3: En este último paso se quiere demostrar que $\mathbb{E}(\mathbf{H}_n(x, y) - g(x, y) p_s^\beta(x, y))^2$ tiende a 0 cuando n tiende a ∞ . Cada coordenada de $\mathbb{E}(\mathbf{H}_n(x, y) - g(x, y) p_s^\beta(x, y))^2$ se puede reescribir como sigue:

$$\mathbb{E}(\mathbf{H}_n^k(x, y) - g^k(x, y) p_s^\beta(x, y))^2 \leq 3 \left(\mathcal{J}_{1n}^k + \mathcal{J}_{2n}^k + \mathcal{J}_{3n}^k\right) \quad \text{con} \quad (2.104)$$

$$\mathcal{J}_{1n}^k = \mathbb{E}\left(H_n^k(x, y) - \hat{H}_n^k(x, y)\right)^2, \quad \mathcal{J}_{2n}^k = \mathbb{E}\left(\hat{H}_n^k(x, y) - \tilde{H}_n^k(x, y)\right)^2 \quad y$$

$$\mathcal{J}_{3n}^k = \mathbb{E}\left(\tilde{H}_n^k(x, y) - g^k(x, y) p_s^\beta(x, y)\right)^2. \quad (2.105)$$

De (2.94) y (2.103) se obtiene que:

$$\mathcal{J}_{1n}^k + \mathcal{J}_{2n}^k = O\left(\frac{h_n}{(n-1) b_{1,n}^d b_{2,n}^d} + h_n (b_{1,n} b_{2,n})^{\frac{d}{p}-2d}\right). \quad (2.106)$$

Ahora será considerado el término, \mathcal{J}_{3n}^k definido en (2.105). De la estacionaridad se consigue lo siguiente:

$$\mathbb{E} \tilde{H}_n^k(x, y) = \int K(u_1, v_1) g^k(x - b_{1,n}u_1, y - b_{2,n}v_1) p_s^\beta(x - b_{1,n}u_1, y - b_{2,n}v_1) du_1 dv_1.$$

El comportamiento asintótico de este término puede ser clásicamente manejado de acuerdo con la hipótesis (iv) (ver e.g., [11, page 14]). Se consigue lo siguiente

$$(n-1)b_{1,n}^d b_{2,n}^d h_n \mathcal{J}_{3n}^k = (n-1)b_{1,n}^d b_{2,n}^d h_n (\mathbb{E}[\tilde{H}_n^k(x, y) - g^k(x, y) p_s^\beta(x, y)])^2 = o(1). \quad (2.107)$$

De (2.106) y (2.107) por cada k se consigue que:

$$\mathbb{E}(\mathbf{H}_n^k(x, y) - g^k(x, y) p_s^\beta(x, y))^2 = O\left(\frac{1}{(n-1)b_{1,n}^d b_{2,n}^d h_n} + h_n (b_{1,n} b_{2,n})^{\frac{d}{p} - 2d}\right). \quad (2.108)$$

Como (i) – (ii'), (iv) – (v) en el Teorema 2.3.2.2 implican (i) – (ii), (iv) – (v) en el Teorema 2.3.1.3, se consigue la cota declarada en (2.88). Así, del Teorema de Slutsky y de (2.108) se consigue que:

$$\mathbb{E}\left(\frac{\mathbf{H}_n}{\tilde{p}_s^\beta}(x, y) - g(x, y)\right)^2 = O\left(\frac{1}{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d h_n} + h_n (b_{1,n} b_{2,n})^{\frac{d}{p} - 2d}\right).$$

Entonces, seleccionando $p > 1$ tal que (iii) in el Teorema 2.3.2.2 es satisfecho, se obtiene (2.89) lo cual concluye la prueba del Teorema 2.3.2.2. ■

Distribución inicial puntual

2.3.3. Estimación de la varianza y del gradiente del potencial

En esta sección se considera la estimación para σ^2 y $-\beta \nabla V(x)$, la estimación de σ^2 es consecuencia directa de los resultados demostrados para el drift y, la estimación para $-\beta \nabla V(x)$ se debe a que $p_s^\beta(x, y) = C(\beta) e^{-\beta(|y|^2 + V(x))}$ y esto implica que $\frac{\nabla_x p_s^\beta}{p_s^\beta}(x, y) = -\beta \nabla V(x)$. El Teorema Central del límite correspondiente a la estimación de $\nabla V(x)$ se concentrará entonces en el estimador natural $\frac{\nabla_x \tilde{p}_s^\beta}{\tilde{p}_s^\beta}(x, y)$ de $\frac{\nabla_x p_s^\beta}{p_s^\beta}(x, y)$.

Estimación de la varianza y del gradiente del potencial

Teorema 2.3.3.1 Supongamos que $(\mathbf{e}_i)_{i=1, \dots, d}$ denota la base canónica de \mathbb{R}^d . Bajo las mismas hipótesis del Teorema 2.3.2.2 se consigue lo siguiente :

$$- \langle \hat{g}_n(x, \mathbf{e}_i) - \hat{g}_n(x, 0), \mathbf{e}_j \rangle \xrightarrow{\mathbb{P}_z} \sigma_{ij}^2(x).$$

Demostración 9 La prueba es directa a partir del Teorema 2.3.2.2. ■

Estimación del del gradiente del potencial

Teorema 2.3.3.2 Suponamos que las hipótesis \mathcal{H}_0 , \mathcal{H}_1 y \mathcal{H}_2 son satisfechas, y supongamos que los parámetros $b_{1,n}$, $b_{2,n}$ y h_n del estimados \tilde{p}_s^β definido en (2.53) satisfacen las hipótesis (i), (ii), (iii), (iv) and (v) del Teorema 2.90. Si asumimos que el kernel K es dos veces continuamente diferenciable en su soporte A , que es acotado por hipótesis, entonces, para cualquier condición inicial $z_0 = (x_0, y_0)$ en (2.2) se consigue lo siguiente:

$$\sqrt{nb_{1,n}^{(d+2)}b_{2,n}^d} \left(\frac{\nabla_x \tilde{p}_s^\beta}{\tilde{p}_s^\beta}(x, y) + \beta \nabla V(x) \right) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathcal{D}} \mathcal{N}(0, \mathbf{L}(x, y)),$$

donde $\mathbf{L} = (l_{i,j}(x, y))_{1 \leq i, j \leq d}$ es una matriz cuadrada y diagonal

$$l_{jj}(x, y) = \frac{1}{p_s^\beta(x, y)} \int (\partial_{x_j} K(u, v))^2 dudv.$$

Demostración 10 Análogo a lo hecho en las dos previas secciones, a continuación será considerado el caso estacionario, es decir, se considera la solución de (2.2) con distribución inicial $(X_0, Y_0) \sim p_s^\beta(z) dz$ con p_s^β definido en (2.22) y $l_n \equiv 0$ en (2.53). La extensión al caso no estacionario es similar a la desarrollada en las dos secciones anteriores. Consideremos la siguiente conveniente reescritura :

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_n(x, y) &:= \left(\frac{\nabla_x \tilde{p}_s^\beta}{\tilde{p}_s^\beta}(x, y) + \beta \nabla V(x) \right) = \left(\frac{\nabla_x \tilde{p}_s^\beta}{\tilde{p}_s^\beta}(x, y) - \frac{\nabla_x p_s^\beta}{\tilde{p}_s^\beta}(x, y) \right) + \left(\frac{\nabla_x p_s^\beta}{\tilde{p}_s^\beta}(x, y) + \beta \nabla V(x) \right) \\ &= \frac{1}{\tilde{p}_s^\beta(x, y)} (\nabla_x \tilde{p}_s^\beta(x, y) - \nabla_x p_s^\beta(x, y)) - \frac{\nabla_x p_s^\beta}{\tilde{p}_s^\beta p_s^\beta}(x, y) (\tilde{p}_s^\beta(x, y) - p_s^\beta(x, y)). \end{aligned}$$

Entonces, considerando la observación 2.3.1.6 se consigue que el segundo término a la derecha de última identidad es $O_{\mathbb{P}_z} \left((nb_{1,n}^d b_{1,n}^d)^{-1/2} \right)$. Por otra parte, si \mathcal{D} denota la convergencia en distribución se consigue lo siguiente:

$$\begin{aligned} \mathcal{D} \lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt{nb_{1,n}^{(d+2)}b_{2,n}^d} \mathcal{A}_n(x, y) &= \mathcal{D} \lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt{nb_{1,n}^{(d+2)}b_{2,n}^d} \frac{1}{\tilde{p}_s^\beta(x, y)} (\nabla_x \tilde{p}_s^\beta(x, y) - \nabla_x p_s^\beta(x, y)) \\ &= \frac{1}{p_s^\beta(x, y)} \mathcal{D} \lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt{nb_{1,n}^{(d+2)}b_{2,n}^d} (\nabla_x \tilde{p}_s^\beta(x, y) - \nabla_x p_s^\beta(x, y)), \end{aligned}$$

donde la última línea se obtiene a partir del Teorema de Slutsky. En lo que sigue nos concentramos en el estudio de la convergencia en distribución de

$$\mathcal{R}_n := \sqrt{nb_{1,n}^{(d+2)}b_{2,n}^d} (\nabla_x \tilde{p}_s^\beta(x, y) - \nabla_x p_s^\beta(x, y)). \quad (2.109)$$

Supongamos que ∂_{x_l} denota la derivada parcial con respecto a la variable x_l . Entonces, a partir de las desigualdad [20, Section 1.2.2, p. 9, Theorem 3, Item (1)], se consigue lo siguiente:

$$\text{Cov}(\partial_{x_j} \tilde{p}(x, y), \partial_{x_l} \tilde{p}(x, y)) = O\left(\frac{p_s^\beta(x, y)}{nb_{1,n}^{(d+2)}b_{2,n}^d} \int \partial_{x_j} K(u, v) \partial_{x_l} K(u, v) dudv\right).$$

Por lo tanto, como consecuencia de que K es soporte compacto se tiene:

$$(nb_{1,n}^{(d+2)}b_{2,n}^d) \text{Cov}(\partial_{x_j} \tilde{p}(x, y), \partial_{x_l} \tilde{p}(x, y)) \rightarrow \delta_{jl} p_s^\beta(x, y) \int (\partial_{x_j} K(u, v))^2 dudv,$$

donde δ_{ij} corresponde al símbolo de Kronecker.

La sucesión aleatoria \mathcal{R}_n definida en (2.109) es la sucesión de sumas correspondientes a una matriz triangular de β -mixing vectores aleatorios en \mathbb{R}^d . Como una fácil modificación correspondiente al Teorema de Cramer-Wald se puede extender el resultado del Teorema 2.3.1.2 a vectores aleatorios. Entonces,

considerando $\mathbf{D}(x, y) = (d_{ij}(x, y))$ como una matriz diagonal y suponiendo que las sucesiones h_n , $b_{1,n}$ y $b_{2,n}$ satisfacen las hipótesis (i), (ii)', (iii)' y (iv), entonces,

$$\mathcal{R}_n \xrightarrow{\mathcal{D}} \mathcal{N}(0, \mathbf{D}(x, y)) \text{ where } d_{jj}(x, y) = p_s^\beta(x, y) \int (\partial_{x_j} K(u, v))^2 du dv.$$

Lo anterior implica :

$$\sqrt{nb_{1,n}^{(d+2)} b_{2,n}^d} \mathcal{A}_n(x, y) \xrightarrow{\mathcal{D}} N(0, \mathbf{L}(x, y))$$

donde \mathbf{L} es diagonal y $l_{jj}(x, y) = \frac{1}{p_s^\beta(x, y)} \int (\partial_{x_j} K(u, v))^2 du dv$. y es suficiente para concluir la prueba.

■

Capítulo 3

Experimentos numéricos sobre Procesos Hamiltonianos Amortiguados.

Este capítulo está dedicado a la descripción de experimentos numéricos asociados a los estimadores propuestos en el capítulo anterior. Específicamente, en la sección 3.1 será descrito el método numérico usado para aproximar las soluciones de la EDE en (2.2) con las que se calcularán valores de los estimadores antes mencionados, en la subsección 3.2.1 se describirán los resultados de estas estimaciones cuando el término de difusión es constante y el potencial es polinómico, en la sección 3.2.2 se describirán resultados de experimentos similares cuando el término de difusión no es constante y el potencial es polinómico, y finalmente en la sección 3.2.3 se considera un potencial periódico. Cada subsección presenta resultados del error cuadrático medio integrado relativo de cada estimador, y también se presentan pruebas de la tasa de convergencia del método del algoritmo considerado para estimar las trayectorias del sistema en estudio .

3.1. Método de aproximación de trayectorias

Bajo las hipótesis \mathcal{H}_0 , \mathcal{H}_1 y (2.27) declaradas en la sección 2.1, el desarrollo hecho en el capítulo 2 garantiza:

- la existencia de una solución exponencialmente ergódica $(X_t, Y_t)_{t \geq 0}$ del sistema en (2.2):

$$\begin{cases} dX_t = Y_t dt, \\ dX_t = -(\nabla V(X_t) dt + \sigma^2(X_t) Y_t) dt + (2\beta^{-1})^{\frac{1}{2}} \sigma(X_t) dB_t, \end{cases} \quad (3.1)$$

donde $(X_t, Y_t) \in \mathbb{R}^{2d}$, con d entero y $d > 0$,

- la convergencia de \tilde{p}_s^β definido por:

$$\tilde{p}_s^\beta(x, y) := \frac{1}{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d} \sum_{i=l_n+1}^{l_n+n} K\left(\frac{x - X_{ih_n}}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_{ih_n}}{b_{2,n}}\right) \quad \text{con } K \in C_0^2, \quad (3.2)$$

a su densidad invariante $p_s^\beta = C(\beta) e^{-\frac{1}{2}y^T y - V(x)}$,

- la convergencia de \tilde{g}_n definido por:

$$\tilde{g}_n = \frac{H_n}{\tilde{p}_s^\beta} \quad \text{con} \quad H_n(x, y) = \frac{1}{(n-1)b_{1,n}^d b_{2,n}^d} \sum_{i=l_n+1}^{l_n+n-1} K\left(\frac{x - X_{ih_n}}{b_{1,n}}, \frac{y - Y_{ih_n}}{b_{2,n}}\right) \frac{Y_{(i+1)h_n} - Y_{ih_n}}{h_n} \quad (3.3)$$

al drift $g = -(\nabla V(x) dt + \sigma^2(x)y)$,

- y la convergencia de

$$\tilde{\sigma}_{ij}^2 = - \langle \hat{g}_n(x, \mathbf{e}_i) - \hat{g}_n(x, 0), \mathbf{e}_j \rangle \quad \text{y} \quad \frac{\nabla_x \tilde{p}_s^\beta}{\tilde{p}_s^\beta} \quad (3.4)$$

a σ_{ij}^2 y $-\beta \nabla V$ respectivamente.

Conforme a su definición, para calcular \tilde{p}_s^β , \tilde{g} , $\tilde{\sigma}^2$ y $\nabla_x \tilde{p}_s^\beta / \tilde{p}_s^\beta$ es necesario evaluarlos en una muestra $(X_{ih_n}, Y_{ih_n})_{i=l_n}^{l_n+n}$ de una realización de $(X_t, Y_t)_{t \geq 0}$. Pero en la mayoría de los casos de interés no es posible obtener una solución analítica de (3.1) por lo que es necesario determinar una solución numérica.

En este trabajo, las simulaciones $(\tilde{X}_i, \tilde{Y}_i)_{i=1}^n$ de $(X_{ih_n}, Y_{ih_n})_{i=l_n+1}^{l_n+n}$ se obtienen usando un algoritmo del tipo Metropolis-Hastings cuya construcción se basa en la discretización, por separado, de la llamada "parte Hamiltoniana" del sistema en (3.1):

$$\begin{cases} dX_t = Y_t dt, \\ dY_t = -\nabla V(X_t) dt \end{cases} = \begin{cases} dX_t = \nabla_y H(X_t, Y_t) dt, \\ dY_t = -\nabla_x H(X_t, Y_t) dt, \end{cases} \quad (3.5)$$

donde $H(x, y) = \frac{1}{2} y^T y + V(x)$ es el Hamiltoniano, y la llamada "parte del termostato" del mismo sistema:

$$\begin{cases} dX_t = 0, \\ dY_t = -\sigma^2(X_t) Y_t dt + (2\beta^{-1})^{\frac{1}{2}} \sigma(X_t) dB_t, \end{cases} \quad (3.6)$$

La parte Hamiltoniana se obtiene cuando σ es una matriz de ceros en (3.1) y la parte del termostato se obtiene anulando los términos que no están asociados a σ en (3.1), es decir, anulando ∇H .

Esta estrategia de separación se basa en el hecho de que, de acuerdo con (2.18):

$$\mathcal{L} = \underbrace{\frac{1}{\beta} \sum_{i,j=1}^d (\sigma^2)_{ij}(x) \partial_{y_i} \partial_{y_j} - \sigma^2(x) y \cdot \nabla_y}_{\mathcal{L}^{Ter}} + \underbrace{y \cdot \nabla_x - \nabla_x V(x) \cdot \nabla_y}_{\mathcal{L}^{Ham}}$$

y esto quiere decir que el generador infinitesimal de (3.1) se puede descomponer como la suma de dos contribuciones: \mathcal{L}^{Ham} correspondiente al sistema en (3.5) y \mathcal{L}^{Ter} correspondiente al sistema en (3.6).

La discretización del sistema Hamiltoniano en (3.5) que se considera en el algoritmo corresponde el esquema de Verlet que sigue

$$Y_{n+\frac{1}{2}} = Y_n - \frac{\Delta t}{2} \nabla V(X_n) \quad (3.7)$$

$$X_{n+1} = X_n + \Delta Y_{n+\frac{1}{2}} \quad (3.8)$$

$$Y_{n+1} = Y_{n+\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{2} \nabla V(X_{n+1}), \quad (3.9)$$

(ver [34, página 18] y sus referencias), y la discretización del sistema en (3.6) que se considera en el algoritmo corresponde al esquema de Euler del punto medio:

$$\begin{cases} X_{n+1} = X_n, \\ Y_{n+1} = Y_n - \frac{\Delta t}{2} \sigma^2(X_n) \times (Y_n + Y_{n+1}) + (2\beta^{-1})^{\frac{1}{2}} \sigma(X_n) \sqrt{\Delta t} \Delta B_n, \end{cases} \quad \text{donde } \Delta B_n = B_{n+1} - B_n \quad (3.10)$$

El algoritmo usado para aproximar muestras de $(X_t, Y_t)_{t \geq 0}$ se describe a continuación.

Algoritmo 3.1.0.3 (Método de Monte-Carlo Híbrido Generalizado) Sea $\delta > 0$, se comienza con un punto fijo $(\tilde{X}_0, \tilde{Y}_0)$ en \mathbb{R}^{2d} y se supone que se ha obtenido $(\tilde{X}_n, \tilde{Y}_n)$; luego, se calcula el próximo punto de la discretización $(\tilde{X}_{n+1}, \tilde{Y}_{n+1})$ con la ayuda de las variables auxiliares $\tilde{Y}_{n+\frac{1}{4}}$, $\tilde{Y}_{n+\frac{1}{2}}$, $\tilde{Y}_{n+\frac{3}{4}}$ y \tilde{X}_{n+1} como sigue

1. Se discretiza el sistema (3.6) en las variables $(\tilde{Y}_n, \tilde{X}_n)$, usando (3.10) para el paso de tiempo $\Delta t = \delta/2$:

$$\tilde{Y}_{n+\frac{1}{4}} = \tilde{Y}_n - \frac{\delta}{4}\sigma^2(\tilde{X}_n) \times (\tilde{Y}_n + \tilde{Y}_{n+\frac{1}{4}}) + \sqrt{\frac{\delta}{2}}\sigma(\tilde{X}_n)\varepsilon_n \quad (3.11)$$

y se evalua el Hamiltoniano H definido por $H(x, y) = \frac{y^2}{2} + V(x)$ en la configuración $(\tilde{X}_n, \tilde{Y}_{n+\frac{1}{4}})$

2. Se discretiza el sistema (3.5) evaluado en $(\tilde{\tilde{X}}_{n+1}, \tilde{\tilde{Y}}_{n+\frac{1}{2}})$ usando (3.7)-(3.9) con paso de tiempo δ como sigue:

$$\tilde{Y}_{n+\frac{1}{2}} = \tilde{Y}_{n+\frac{1}{4}} - \frac{\delta}{2}\nabla V(\tilde{X}_n) \quad (3.12)$$

$$\tilde{\tilde{X}}_{n+1} = \tilde{X}_n + \delta\tilde{Y}_{n+\frac{1}{2}} \quad (3.13)$$

$$\tilde{\tilde{Y}}_{n+\frac{3}{4}} = \tilde{Y}_{n+\frac{1}{2}} - \frac{\delta}{2}\nabla V(\tilde{\tilde{X}}_{n+1}) \quad (3.14)$$

3. Se calcula $H(\tilde{\tilde{X}}_{n+1}, \tilde{\tilde{Y}}_{n+\frac{3}{4}})$ y se define $(\tilde{X}_{n+1}, \tilde{Y}_{n+\frac{3}{4}}) = (\tilde{\tilde{X}}_{n+1}, \tilde{\tilde{Y}}_{n+\frac{3}{4}})$ con probabilidad

$$\min\left(1, e^{-\beta\left(H(\tilde{\tilde{X}}_{n+1}, \tilde{\tilde{Y}}_{n+\frac{3}{4}}) - H(\tilde{X}_n, \tilde{Y}_{n+\frac{1}{4}})\right)}\right) \quad (3.15)$$

de otra forma, se rechaza y se define $(\tilde{X}_{n+1}, \tilde{Y}_{n+\frac{3}{4}}) = (\tilde{X}_n, -\tilde{Y}_{n+\frac{1}{4}})$

4. Se discretiza el sistema (3.6) evaluado en $(\tilde{X}_{n+1}, \tilde{Y}_{n+\frac{3}{4}})$ para determinar \tilde{Y}_{n+1} usando (3.10) cuando el paso de tiempo es $\frac{\delta}{2}$:

$$\tilde{Y}_{n+1} = \tilde{Y}_{n+\frac{3}{4}} - \frac{\delta}{4}\sigma^2(\tilde{X}_{n+1}) \times (\tilde{Y}_{n+1} + \tilde{Y}_{n+\frac{3}{4}}) + \sqrt{\frac{\delta}{\beta}}\sigma(\tilde{X}_{n+1})\varepsilon_{n+\frac{1}{2}} \quad (3.16)$$

En el algoritmo anterior $(\varepsilon_0, \varepsilon_{1/2}, \varepsilon_1, \varepsilon_{3/2}, \dots)$ denota una sucesión de números aleatorios independientes provenientes de distribución normal de media cero y varianza uno.

Observación 3.1.0.4 En la práctica, el paso 3. del algoritmo anterior se ejecuta como sigue:

3. Se calcula $H(\tilde{\tilde{X}}_{n+1}, \tilde{\tilde{Y}}_{n+\frac{3}{4}})$ y se genera un número aleatorio U con distribución uniforme en $[0, 1]$.

Si

$$U \leq \min\left(1, e^{-\beta\left(H(\tilde{\tilde{X}}_{n+1}, \tilde{\tilde{Y}}_{n+\frac{3}{4}}) - H(\tilde{X}_n, \tilde{Y}_{n+\frac{1}{4}})\right)}\right), \quad (3.17)$$

se fija $(\tilde{X}_{n+1}, \tilde{Y}_{n+\frac{3}{4}}) = (\tilde{\tilde{X}}_{n+1}, \tilde{\tilde{Y}}_{n+\frac{3}{4}})$ de otra forma, se rechaza y se define $(\tilde{X}_{n+1}, \tilde{Y}_{n+\frac{3}{4}}) = (\tilde{X}_n, -\tilde{Y}_{n+\frac{1}{4}})$.

Observación 3.1.0.5 La aproximación $(\tilde{X}_n, \tilde{Y}_n)_n$ que se genera a partir del método de muestreo anterior es una cadena de Markov aperiódica e irreducible, además se puede verificar que p_s^β también es una densidad invariante para esta cadena de Markov (ver [34, sección 2.2.3.2]). Estas propiedades de $(\tilde{X}_n, \tilde{Y}_n)_n$ garantizan que se verifique el teorema ergódico (1.1.1.3):

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N A(\tilde{X}_k, \tilde{Y}_k) = \mathbb{E}_\mu(A) \quad \text{donde } \mu(dx dy) = p_s^\beta dx dy \quad \text{y } A \in \mathcal{C}_b(\mathbb{R}). \quad (3.18)$$

La convergencia en (3.18) puede no ser suficiente para obtener buenos resultados de los estimadores de interés, debido a que, entre otras cosas, esto también depende del tamaño n de la muestra que en la práctica real puede ser considerado. Entran en juego entonces la velocidad de convergencia y otros elementos que describiremos brevemente a continuación.

Convergencia del método de muestreo

Si $f_n(x, y, (X_t, Y_t)_{t \geq 0})$ es un estimador convergente de $f(x, y)$, la eficiencia del método de muestreo usado para simular la muestra de $(X_t, Y_t)_{t \geq 0}$ con la que se calculará f_n es medida en función de los siguientes criterios;

1. Longitud de correlación de una muestra: este criterio está asociado a la cantidad de submuestras aproximadamente independientes que se pueden obtener de una muestra $(\tilde{X}_i, \tilde{Y}_i)_{i=1}^N$ generada a partir de una técnica de muestreo. Intuitivamente, si NC denota la longitud de correlación entonces una muestra de tamaño N tendrá $n = N/NC$ submuestras aproximadamente independientes. La longitud de correlación NC se estima en función de la varianza asintótica del estimador de interés (ver[34, sección 2.3]). En la práctica, dado N y una vez estimado o fijado el valor de NC , se selecciona un elemento de cada submuestra "independiente" de $(\tilde{X}_k, \tilde{Y}_k)_{k=1}^N$ determinada por NC , para formar una colección de N variables aproximadamente independientes. Con esta construcción se quiere simular en $(\tilde{X}_l, \tilde{Y}_l)_{l=1}^n$ la propiedad β -mixing declarada en (1.76) que verifica la solución de (3.1) que se está aproximando con el algoritmo de muestreo 3.1.0.3 ..
2. El error cuadrático medio MSE del estimador de interés: esta es una de las formas clásicas de medir el error de estimación, se define como sigue,

$$MSE(x, y) = \mathbb{E} (f_n(x, y, (\tilde{X}_k, \tilde{Y}_k)_{k=1}^N) - f(x, y))^2.$$

Como el error medido por $MSE(x, y)$ depende de x e y , para medir un comportamiento global del estimador se usa el error cuadrático medio integrado relativo. Este error es usualmente denotado por $RMISE$, es definido como sigue,

$$RMISE = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \mathbb{E} [f_n(x, y, (\tilde{X}_k, \tilde{Y}_k)_{k=1}^N) - f(x, y)]^2 dx dy}{\int_{-\infty}^{\infty} f^2(x, y)},$$

y es aproximado por el siguiente promedio

$$RMISE \sim \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \frac{\frac{1}{L} \sum_{l=1}^L [f_n(x_l, y_l, (U_1^m, V_1^m), \dots, (U_n^m, V_n^m)) - f(x_l, y_l)]^2}{\frac{1}{L} \sum_{l=1}^L (f(z_l))^2} \quad (3.19)$$

donde L denota el número de nodos correspondientes a la discretización del dominio de p_s^β que se está considerando, y $(U_k^m, V_k^m)_{k=1}^n$ es la m -ésima muestra de un total de M obtenidas de forma independiente usando el algoritmo 3.1.0.3 para generar $(\tilde{X}_k^m, \tilde{Y}_k^m)_{k=1}^N$ y luego seleccionar de esta muestra $(U_k^m, V_k^m)_{k=1}^n$ en función de NC , con un procesamiento que se describirá en la próxima sección.

3. La tasa de convergencia de la ley de $(\tilde{X}_k, \tilde{Y}_k)$ a p_s^β es medida calculando la diferencia $RC : ns \rightarrow R$ definida como sigue:

$$RC(n) = \left| \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f_p(U_i, V_i) - \int f_p(x, y) p_s^\beta(x, y) dx dy \right| \quad \text{para } n \in ns \quad (3.20)$$

donde ns es una sucesión creciente de enteros mayores a cero, K es una densidad en \mathbb{R}^{2d} con soporte compacto y $\{U_1, \dots, U_n\}$ y $\{V_1, \dots, V_n\}$ son como se definió en el item anterior cuando $M = 1$. Este error es aproximado por,

$$RC(n) \sim \left| \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f_p(U_i, V_i) - \sum_{l=1}^L f_p(x_l, y_l) p_s^\beta(x_l, y_l) \Delta x \Delta y \right| \quad \text{para } n \in ns \quad (3.21)$$

4. **Metastabilidad:** generalmente los estimadores de interés f_n pueden ser expresados como promedios. En la práctica, estos promedios convergen muy lentamente al elemento que están estimando y de acuerdo con [34, sección 1.3] esto se debe a que las trayectorias generadas por el método numérico en uso, generalmente permanecen atrapadas en una region del espacio de estados por largo tiempo y ocasionalmente salen de esta a otra región en donde se quedan atrapadas por un largo tiempo también. Estas regiones o subconjuntos del espacio de estados son llamadas metastables.

De acuerdo con intuiciones físicas y químicas es posible modelar la metastabilidad usando una función $\xi : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^m$ con $m \leq d$, usualmente llamada reacción de coordenadas. El objetivo de definir esta función es polarizar el potencial V de la EDE en estudio para de esta manera generar trayectorias que aceleren la convergencia en (3.18).

Observación 3.1.0.6 *Un estudio formal del error de estimación no forma parte de este trabajo de tesis. Nosotros sólo aproximaremos RC y RMISE definidos arriba, no estimamos NC, escojemos un valor referencial para realizar las estimaciones. Con respecto a la metastabilidad, veremos algunas representaciones gráficas de trayectorias aproximadas en las que se pone de manifiesto la metastabilidad y algunas de sus consecuencias al evaluar los estimadores en estas trayectorias. Una buena referencia para revisar este tema es [34].*

3.2. Simulación de parámetros de un sistema estocástico Hamiltoniano

En esta sección se exponen los resultados de simulaciones correspondientes a cuatro sistemas diferentes del tipo (3.1). Específicamente, para cada uno de estos sistemas se simulará su densidad invariante p_s^β , su drift $g = -(\nabla V(x)dt + \sigma^2(x)y)$, el cuadrado de su coeficiente de difusión σ^2 y el gradiente de su potencial ∇V usando los estimadores \tilde{p}_s^β , \tilde{g} , $\tilde{\sigma}^2$ y $\nabla_x \tilde{p}_s^\beta / \tilde{p}_s^\beta$ respectivamente. Adicionalmente, para dar una medida del desempeño de las simulaciones, se aproximará la tasa de convergencia de las trayectorias simuladas y se calculará también la aproximación del RMISE correspondiente al estimador de la densidad invariante. Para las simulaciones consideramos $d = 1$ y $\beta = 2$ en (3.1).

3.2.1. Modelo 1: Coeficiente de difusión constante y potencial polinómico

Esta subsección está dedicada a la descripción del procedimiento por medio del cual se estiman los parámetros de la EDE

$$\begin{cases} dX_t = Y_t dt \\ dY_t = 2dB_t - (4Y_t + 36X_t^5 - 48X_t^3 + 12X_t)dt, \end{cases} \quad (3.22)$$

es decir, el sistema en (3.1) cuando $V(x) = 6x^6 - 12x^4 + 6x^2 + \frac{1}{7}$ y $\sigma(x) = 2$. Este sistema verifica las hipótesis del sistema estudiado en la sección 2.2.1, son válidos entonces todos los resultados de convergencia para los estimadores de interés demostrados en el capítulo anterior.

Conforme a su definición en (3.2), (3.3) y (3.4), para calcular los estimadores \tilde{p}_s^β , \tilde{g} , $\tilde{\sigma}^2$ y $\nabla_x \tilde{p}_s^\beta / \tilde{p}_s^\beta$ es necesario: simular una trayectoria que satisfaga el sistema en (3.22), determinar el dominio de los estimadores en función de la trayectoria generada y finalmente evaluar los estimadores en esta trayectoria por cada elemento de una discretización del dominio construído. A continuación se describe cada uno de estos pasos.

1. **Simulación de trayectorias:** para generar una aproximación de la muestra $(X_{kh_n}, Y_{kh_n})_{k=l_n+1}^{n+l_n}$ de $(X_t, Y_t)_{t \geq 0}$ en la que se deben evaluar los estimadores de interés, primero se escoge (o estima) un valor para la longitud de correlación NC con el fin de determinar un paso de tiempo inicial δ

a partir de la identidad $\delta = \frac{h_n}{NC}$ y se genera la aproximación $(\tilde{X}_k, \tilde{Y}_k)_{k=1}^N$ de la muestra $(X_{k\delta}, Y_{k\delta})_{k=1}^N$ usando el algoritmo 3.1.0.3 con paso de tiempo δ . Luego, se selecciona la submuestra $(U_k, V_k)_{k=1}^{n+l_n}$ definida por $U_k = \tilde{X}_{k \times NC}$ y $V_k = \tilde{Y}_{k \times NC}$ para $k = 1, \dots, n+l_n$ y finalmente, de la muestra que se acaba de construir se desestiman los primeros l_n elementos y se conserva la muestra $(U_k, V_k)_{k=l_n+1}^{n+l_n}$ que es, por construcción, una aproximación de la muestra $(X_{kh_n}, Y_{kh_n})_{k=l_n+1}^{n+l_n}$. Para que esta construcción se pueda llevar a cabo N debe verificar la identidad $N = (n+l_n) \times NC$.

En este trabajo se determina h_n en función del tamaño de la muestra n y de un parámetro γ a partir de la identidad $h_n = n^{-\gamma}$. El parámetro γ se escoge convenientemente junto con otros dos parámetros α_1 y α_2 para que verifiquen la desigualdad en (2.83) que es equivalente a las hipótesis del teorema 2.3.1.4 (ver la observación 2.3.1.5). Los parámetros α_1 y α_2 definen a $b_{1,n} = n^{\alpha_1}$ y $b_{2,n} = n^{\alpha_2}$ en los estimadores estudiados.

En la figura 3.1 que sigue se puede observar la representación gráfica de la aproximación discreta de una trayectoria de X (posición) y una trayectoria de Y (velocidad) correspondientes a (3.22), a la derecha e izquierda respectivamente. Para generar estas aproximaciones se usó el tamaño de muestra $n = 10^6$, $l_n = n$ y el parámetro $\gamma = 0,15$ para definir h_n .

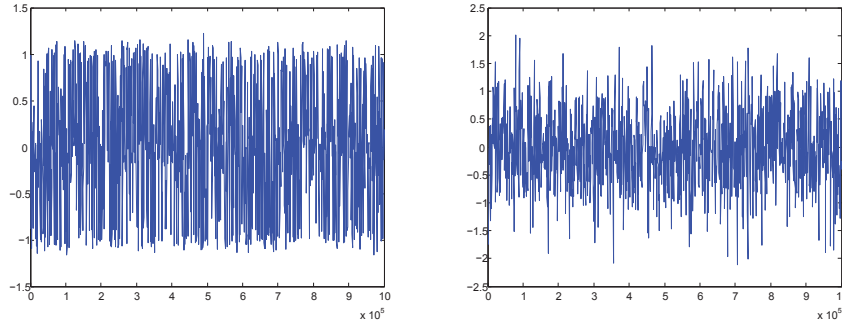


Figura 3.1: A la izquierda: aproximación de una trayectoria de X . A la derecha: aproximación de la trayectoria correspondiente de Y .

2. Determinar el dominio de los estimadores: conforme a su definición, todos los estimadores de interés son funciones que dependen del estimador \tilde{p}_s^β . Esto garantiza que su soporte, el cual denotamos por $S_{\tilde{p}_s^\beta}$, determine el soporte del resto de los estimadores. Entonces, para definir el dominio de los estimadores es necesario determinar $S_{\tilde{p}_s^\beta}$ y luego agregar la restricción que corresponda con la definición particular de cada estimador. Si $(U_k, V_k)_{k=l_n+1}^{n+l_n}$ se construye siguiendo los pasos del ítem anterior, por definición, $S_{\tilde{p}_s^\beta}$ está definido como sigue

$$S_{\tilde{p}_s^\beta} = \bigcup_{i=l+1}^{n+l} [U_i - b_{1,n}, U_i + b_{1,n}] \times [V_i - b_{2,n}, V_i + b_{2,n}], \quad (3.23)$$

y el rectángulo más pequeño que lo contiene es

$$D_m = [\min\{U_i - b_{1,n}\}_{i=1}^n, \max\{U_i + b_{1,n}\}_{i=1}^n] \times [\min\{V_i - b_{2,n}\}_{i=1}^n, \max\{V_i + b_{2,n}\}_{i=1}^n]. \quad (3.24)$$

Entonces, \tilde{p}_s^β se calculará sobre una malla $(z_l)_{l=1, \dots, L} = (x_l, y_l)_{l=1, \dots, L}$ del producto cartesiano D_m definido en (3.24).

3. Cálculo de estimaciones: a continuación se evalúan los estimadores de interés y se muestran las representaciones gráficas correspondientes.

Estimación de la densidad invariante

La densidad invariante correspondiente al sistema en (3.22) es :

$$p_s^\beta(x, y) = C(\beta)e^{-\beta(\frac{1}{2}y^T y + 6x^6 - 12x^4 + 6x^2 + \frac{1}{7})} \quad \text{con} \quad C(\beta) = \int_{\mathbb{R}^{2d}} e^{-\beta(\frac{1}{2}y^T y + 6x^6 - 12x^4 + 6x^2 + \frac{1}{7})} dx dy. \quad (3.25)$$

para $(x, y) \in \mathbb{R}^2$, y en este trabajo se estima usando el estimador no paramétrico

$$\tilde{p}_s^\beta(x, y) = \frac{1}{nb_{1,n}^d b_{2,n}^d} \sum_{i=l_n+1}^{n+l_n} K\left(\frac{x-U_i}{b_{1,n}}, \frac{y-V_i}{b_{2,n}}\right), \quad (3.26)$$

donde K es el kernel de Epanechnikov definido por

$$K(u, v) = K_e(u) \times K_e(v) \quad \text{con} \quad K_e(w) = \frac{3}{4}(1-w^2)1_{|w| \leq 1}$$

y los parámetros $h_n = n^{-\gamma}$, $b_{1,n} = n^{-\alpha_1}$ y $b_{2,n} = n^{-\alpha_2}$ están determinados por $n = 10^6$, $\gamma = 0,15$, $\alpha_1 = 0,2$, $\alpha_2 = 0,2$. Además, se considera $l_n = n$ y $NC = 30$. La muestra $(U_k, V_k)_{k=l_n+1}^{n+l_n}$ es construida como se describió en 1. de la numeración anterior, y se escogió $(X_0, Y_0) = (0, 0)$ como condición inicial del sistema en estudio. El estimador \tilde{p}_s^β es calculado para cada elemento de una discretización $(x_l, y_l)_{l=1}^L$ del producto cartesiano D_m definido en (3.24).

En la figura 3.2 podemos ver a la izquierda el gráfico de la función p_s^β y a la derecha el gráfico de su estimación \tilde{p}_s^β . En la figura 3.3 podemos ver a la izquierda una comparación entre la marginal de \tilde{p}_s^β con respecto a X y su estimación, y a la derecha podemos ver una comparación similar pero con respecto a Y . Finalmente, con el objetivo de apreciar gráficamente los límites en el buen desempeño de la estimación, en la figura 3.4 se presenta el gráfico de $|p_s^\beta - \tilde{p}_s^\beta|$

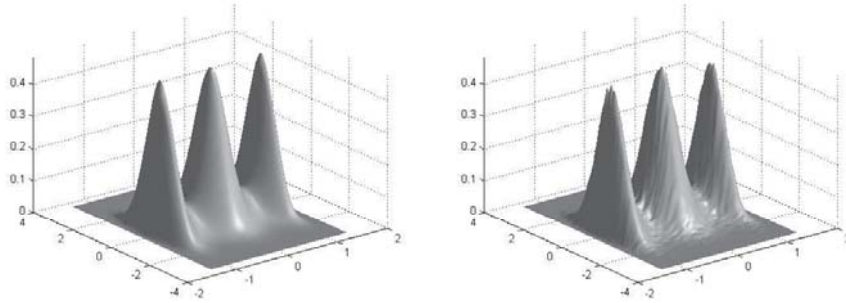


Figura 3.2: Discretización de la densidad invariante a la izquierda y su estimación a la derecha

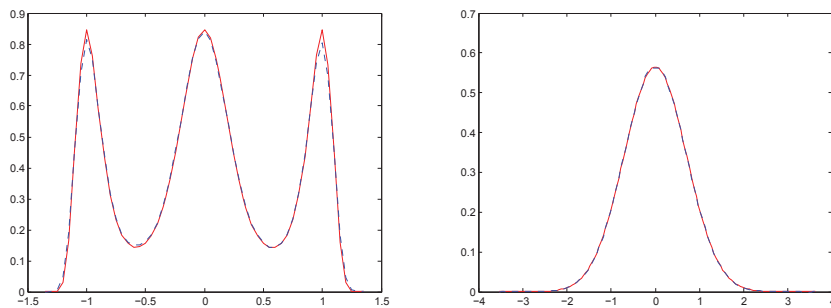


Figura 3.3: A la izquierda: comparación entre la marginal con respecto a X de la densidad invariante (trazo continua) y su estimación (trazo discontinuo). A la derecha: comparación similar respecto a Y .

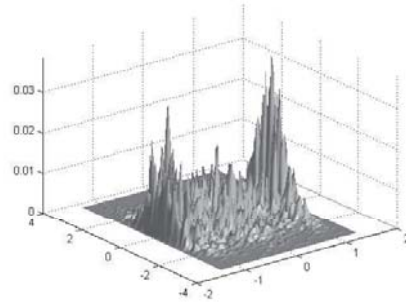


Figura 3.4: Discretización de la diferencia $|p_s^\beta - \tilde{p}_s^\beta|$

Estimación del drift

El drift correspondiente al sistema en (3.22) es la función $g(x) = -4y - 36x^5 + 48x^3 - 12x$. En vista de que su estimador \tilde{g}_n definido por

$$\tilde{g}_n = \frac{H_n}{\tilde{p}_s^\beta} \quad \text{con} \quad H_n(x, y) = \frac{1}{(n-1)b_{1,n}^d b_{2,n}^d} \sum_{i=l_n+1}^{l_n+n-1} K\left(\frac{x-U_i}{b_{1,n}}, \frac{y-V_i}{b_{2,n}}\right) \frac{V_{i+1}-V_i}{h_n} \quad (3.27)$$

presentará problemas de definición en los elementos del dominio donde se anule \tilde{p}_s^β , para calcular la estimación usamos la siguiente "versión regular de \tilde{g}_n ":

$$\tilde{g}_n(x, y) = \frac{H_n(x, y)}{\tilde{p}_s^\beta(x, y) + \varepsilon} \quad (3.28)$$

para ε mayor a cero y suficientemente pequeño, nosotros usamos $\varepsilon = 0,0001$.

La estimación del drift es calculada sobre la misma discretización $(x_l, y_l)_{l=1}^L$ de D_m definido en (3.24), sobre la que se calculó la estimación de la densidad invariante. En la figura 3.5 se presentan gráficos del drift para un valor fijo de y (a la izquierda) y para un valor fijo de x (a la derecha). En estas representaciones se puede observar que la "forma" de la estimación es aproximadamente igual a la original en una restricción central del dominio y también se observan problemas con la estimación en las extremos. Resultados similares se consiguen para cualquier par (x, y) de la discretización $(x_l, y_l)_{l=1}^L$. Debido a lo antes expuesto en una representación bidimensional del drift sobre todo el dominio D_m no se apreciará el desempeño real de la estimación. Se presenta entonces, en la figura 3.6, una discretización del drift y su estimación en una restricción del dominio D_m . Sobre el mismo dominio restringido, donde las formas del drift y de su estimación son similares, se calcula el valor absoluto de la diferencia de estas dos superficies; el gráfico de esta diferencia se expone en la figura 3.7.

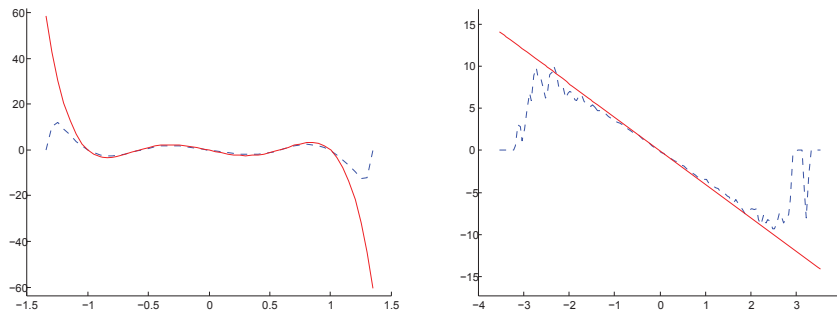


Figura 3.5: Discretización del drift (línea continua) versus su estimación (línea discontinua) para $y_0 = 0,024$ a la izquierda y para $x_0 = 0,02$ a la derecha

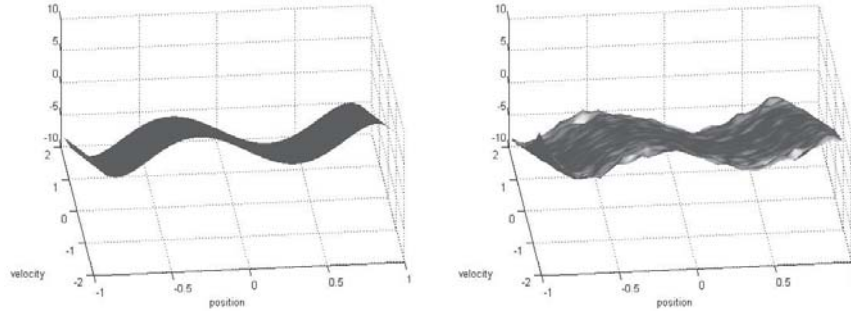


Figura 3.6: Discretización del drift a la izquierda y su estimación a la derecha, ambas calculadas sobre $[-0,85, 0,85] \times [-1,7, 1,7]$ que es una restricción del dominio original D_m .

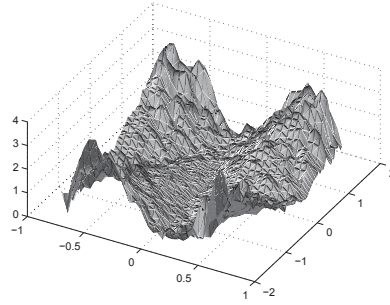


Figura 3.7: Valor absoluto de la diferencia entre el drift y su estimación calculadas sobre una discretización de $[-0,85, 0,85] \times [-1,7, 1,7]$ que es una restricción del dominio original D_m .

Estimación del gradiente del potencial

El modelo estudiado en esta sección tiene como potencial a la función $V(x) = 6x^6 - 12x^4 + 6x^2 + \frac{1}{7}$, en consecuencia: $\nabla V(x) = 36x^5 - 48x^3 + 12x$. En lo que sigue presentaremos resultados de la estimación de $-\beta\nabla V(x) = -2\nabla V(x)$ correspondiente al estimador

$$-\beta\tilde{\nabla}V(x) = \frac{\nabla_x \tilde{p}_s^\beta(x, y)}{\tilde{p}_s^\beta(x, y) + \varepsilon} \quad \text{donde} \quad \nabla \tilde{p}_s^\beta(x, y) = \frac{1}{nb_{1,n}^2 b_{2,n}} \sum_{i=l_n+1}^{n+l_n} \nabla_x K\left(\frac{x-U_i}{b_{1,n}}, \frac{y-V_i}{b_{2,n}}\right) \quad (3.29)$$

y K denota, en este caso, un kernel Gaussiano.

En vista de que el estimador $-\beta\tilde{\nabla}V(x)$ definido a la izquierda en (3.29) es un cociente con numerador $\nabla_x \tilde{p}_s^\beta$, en esta parte presentamos gráficos de la estimación de esta función bidimensional y luego presentaremos los resultados de la estimación de $-\beta\nabla V(x)$. Igual que en el caso del drift, se suma ε suficientemente pequeño al denominador del cociente que define a $-\beta\tilde{\nabla}V$ con el objetivo de regularizar la estimación.

En la figura 3.8, se puede observar la discretización de $\nabla_x p_s^\beta(x, y)$, a la izquierda, y a la derecha su estimación $\nabla_x \tilde{p}_s^\beta(x, y)$. Se observa que las formas de ambas superficies son muy similares pero, en vista de que los gráficos fueron generados sobre sistemas con la misma escala sobre sus ejes, es posible identificar diferencias en las alturas de estas superficies. Las figuras 3.9 pone de manifiesto estas diferencias, en ella se presenta el valor absoluto de la diferencia entre la superficie de $\nabla_x \tilde{p}_s^\beta(x, y)$ y su estimación.

Finalmente, la figura 3.10, presenta la discretización de $-2V'(x)$ para $y_0 = -0,265$. Resultados similares se consiguen para todos los valores de y cercanos al origen.

Las diferencias en la figura 3.7 y en la la figura 3.9 muestran, sobre todo, efectos de frontera. Estos efectos de frontera no son tan significativos para el potencial como para el drift, de hecho, los resultados correspondientes al potencial son presentadas sobre el dominio D_m , mientras que a las estimaciones bidimensionales del drift son presentadas sobre un subconjunto de D_m porque los efectos de frontera de la estimación hacen cuesta arriba la visualización real del comportamiento del estimador. La corrección de estos efectos de frontera debe formar parte de la continuación de la investigación correspondiente al artículo [9] que da soporte a este trabajo de tesis.

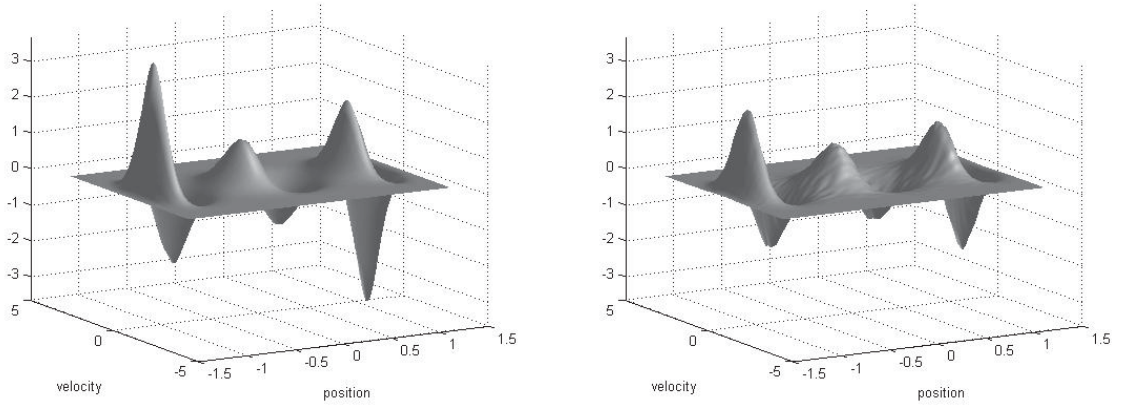


Figura 3.8: Discretización de $\nabla_x p_s(x, y)$ (izquierda), y su estimación (derecha).

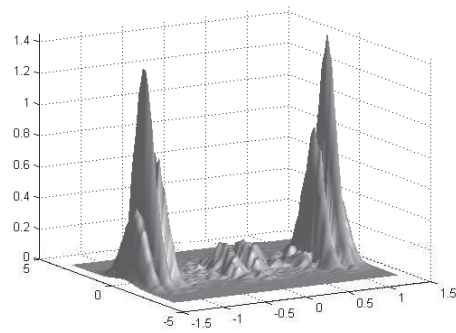


Figura 3.9: Valor absoluto de la diferencia entre $\nabla_x p_s$ y su estimación.

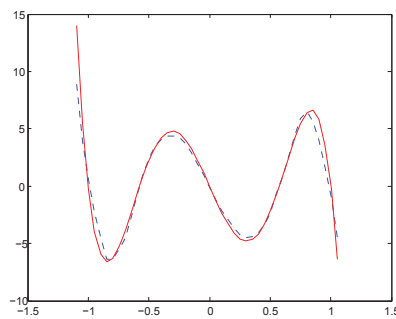


Figura 3.10: Discretización de $-2V'$ (línea continua) y su estimación (línea discontinua) para $y = -0,26$.

Estimación del coeficiente de difusión

En esta parte presentamos gráficos correspondientes a la estimación del coeficiente de difusión. En la figura 3.11 se observan gráficos de la diferencia $\tilde{g}_n(x, y) - \tilde{g}_n(x, 0)$ para dos valores diferentes de y .

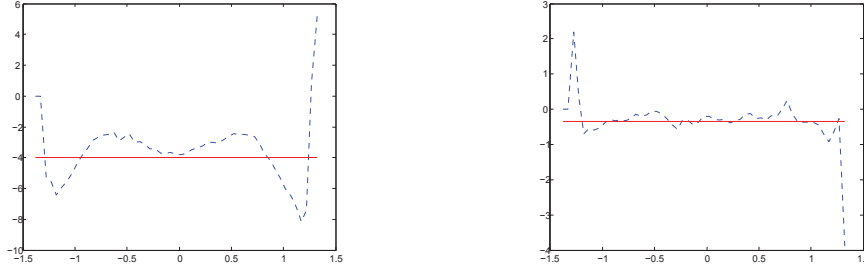


Figura 3.11: Discretización de la función $\sigma^2 y_0$, for $y_0 = 1$ (curva de trazo continuo) versus su estimación (curva de trazo discontinuo), y para $y = 0,085$ a la derecha. La línea continua corresponde al valor de $4y$.

Concluimos que la bondad de la estimación que ofrece $\tilde{g}_n(x, y) - \tilde{g}_n(x, 0)$ al estimar σ^2 depende del valor de y .

Tasa de convergencia y error de estimación

Luego de la descripción correspondiente al procedimiento de aproximación de la solución del sistema en estudio y de sus parámetros, es oportuno presentar resultados que nos permitan sacar algunas conclusiones sobre la bondad de las estimaciones que estamos realizando. Como se señaló en la observación 3.1.0.6 de los criterios que permiten medir el error de estimación nosotros presentaremos resultados de la tasa de convergencia RC definida en (3.21) y del error cuadrático medio integrado relativo $RMISE$ definido en (3.19) correspondiente a la densidad.

En las figuras 3.12 y 3.13 se presentan 4 gráficos del cálculo de RC correspondiente a aproximaciones de trayectorias de X generadas con una sucesión decreciente de valores para el paso de discretización h_n y una sucesión creciente de tamaños de muestras n . Los valores de h_n y n fueron seleccionados de forma tal que a todas las trayectorias aproximadas les correspondiera el mismo tiempo de recorrido $T = h_n \times n$. Cada valor de h_n fue construido en función de un tamaño de muestra n y un parámetro γ de acuerdo con la identidad $h_n = n^{-\gamma}$. Para hacer el cálculo de RC se usa como función de prueba a la densidad triangular f_p definida como sigue: $f_p(x, y) = f_1(x) \times f_2(y)$ donde f_i para $i = 1, 2$ está dado por $f_i(w) = \frac{w-a_i}{b_i-a_i} 1_{\{a_i \leq w \leq b_i\}} + \frac{c_i-w}{c_i-b_i} 1_{\{b_i < w \leq c_i\}}$ con $a_i = -3$, $b_i = 0$ y $c_i = 3$ para $i = 1, 2$.

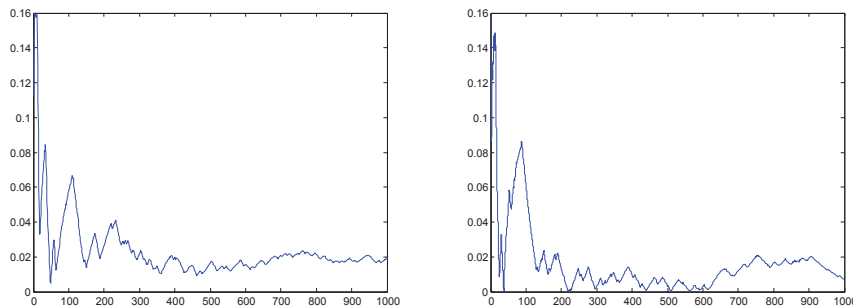


Figura 3.12: A la izquierda: RC correspondiente a una trayectoria aproximada con $h_n = 0,1$ y $n = 10^4$ ($\gamma = 0,25$). A la derecha: RC de a una trayectoria aproximada con $h_n = 0,01$ y $n = 10^5$ ($\gamma = 0,4$).

En las figuras 3.12 y 3.13 observamos que a pesar de disminuir el paso de discretización y de que podríamos inferir la convergencia a 0, esta no ocurre de forma exponencial. Esto pone de manifiesto una posible debilidad de la aplicación de este método de aproximación en nuestro caso debido a que conforme a las hipótesis del modelo,

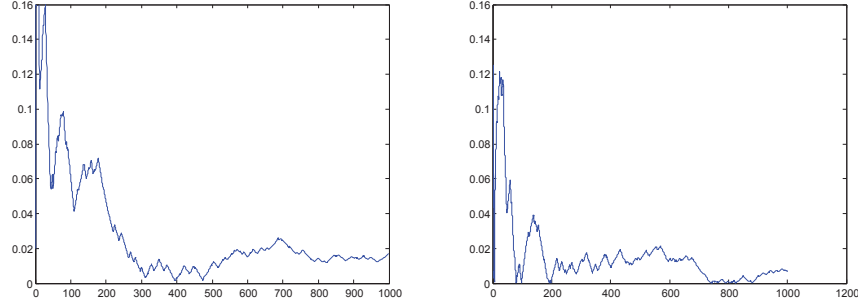


Figura 3.13: A la izquierda: RC correspondiente a una trayectoria aproximada con $h_n = 0,003$ y $n = 284800$ ($\gamma = 0,45$). A la derecha: RC de una trayectoria aproximada con $h_n = 0,0013$ y $n = 762700$ ($\gamma = 0,49$).

Cuadro 3.1: Error cuadrático medio relativo integrado

n	10^3	10^4	10^5	10^6
RMISE	0,2225	0,03841	0,0071	0,0012

el proceso que satisface (3.22), es exponencialmente ergódico y esto garantiza convergencia exponencial a cero de RC .

Para medir el desempeño del método de estimación para la densidad (que es afectado por el desempeño del método de aproximación de trayectorias) se calcula el $RMISE$ considerando 30 muestras aproximadas de la solución de (3.22) para diferentes tamaños de muestra. Estos resultados se registran en la tabla titulada: Cuadro 3.1

Como esperamos, el error relativo decrece cuando n crece.

3.2.2. Modelo 2: Coeficiente de difusión no constante y potencial polinómico

En esta subsección es considerado el siguiente sistema:

$$\begin{cases} dX_t = Y_t dt \\ dY_t = \exp\left(-\frac{1}{X_t^2 + 1}\right) dB_t - \left(\exp\left(-\frac{2}{X_t^2 + 1}\right) Y_t + 36X_t^5 - 48X_t^3 + 12X_t\right) dt. \end{cases} \quad (3.30)$$

en el cual el potencial es $V(x) = 6x^6 - 12x^4 + 6x^2 + 1/7$ y coincide con el modelo anterior pero el coeficiente de difusión aumenta su complejidad porque en este caso es la función no constante $\sigma(x) = e^{\left(-\frac{1}{x^2+1}\right)}$. Análogo al sistema estudiado en la sección anterior, este sistema verifica las hipótesis de la EDE estudiada en la sección 2.2.1, son válidos entonces todos los resultados de convergencia para los estimadores de interés demostrados en el capítulo anterior.

La estimación no paramétrica de los coeficientes del sistema en (3.30) se realiza usando el mismo procedimiento que se usó para el modelo anterior y considerando los mismos valores para los parámetros que definen a los estimadores: $\alpha_1 = 0,2$, $\alpha_2 = 0,2$, $\gamma = 0,15$ y el tamaño de la trayectoria aproximada en la que se evalúan a los estimadores es $n = 10^6$.

Estimación de la densidad invariante

La densidad invariante del sistema en (3.30)

$$p_s(x, y) = C \exp\left(-y^2 - 12x^6 + 24x^4 - 12x^2 - \frac{2}{7}\right),$$

conincide con la densidad invariante del sistema anterior. A continuación se presentan resultados de su estimación.

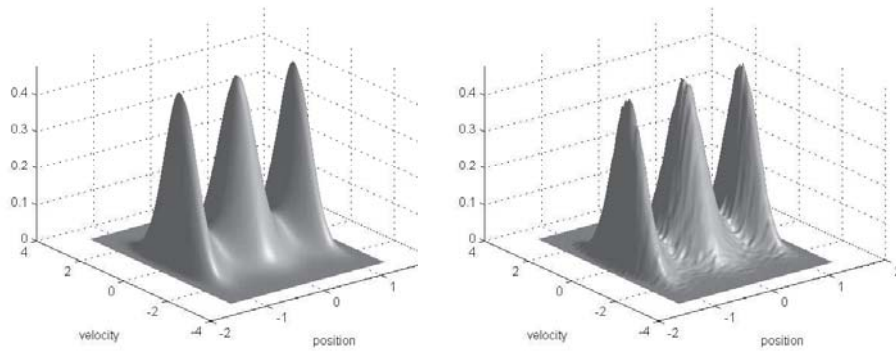


Figura 3.14: Densidad invariante (a la izquierda) y su estimación (a la derecha).

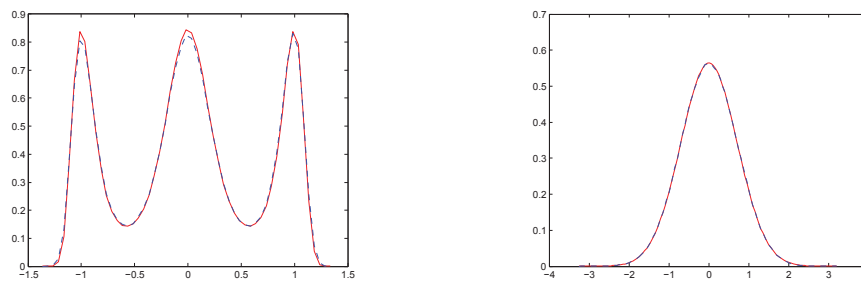


Figura 3.15: A la izquierda: comparación entre la marginal con respecto a X de la densidad invariante (trazo continua) y su estimación (trazo discontinuo). A la derecha: comparación similar respecto a Y .

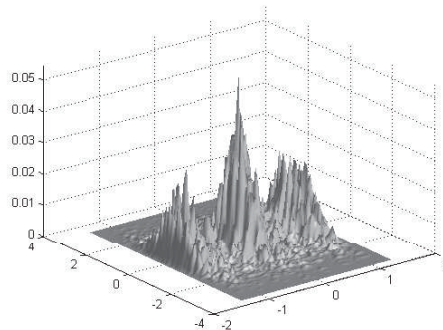


Figura 3.16: Valor absoluto de la diferencia entre la densidad invariante y su estimación.

Estimación del drift

El drift correspondiente al sistema en (3.30)

$$g(x, y) = -\exp\left(-\frac{2}{x^2 + 1}\right)y - 36x^5 + 48x^3 - 12x.$$

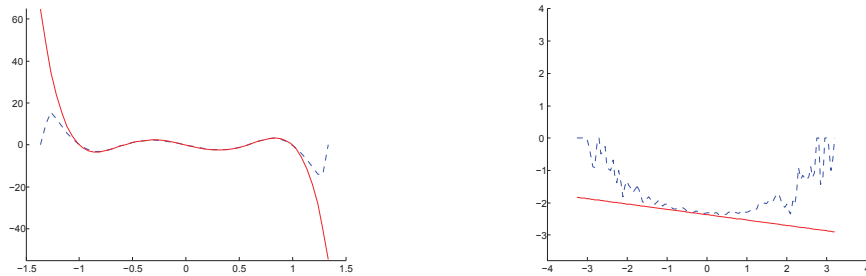


Figura 3.17: Drift (línea continua) versus su estimación (línea discontinua) para $y_0 = 0,005451$ a la izquierda, y para $x_0 = 0,33538$ a la derecha.

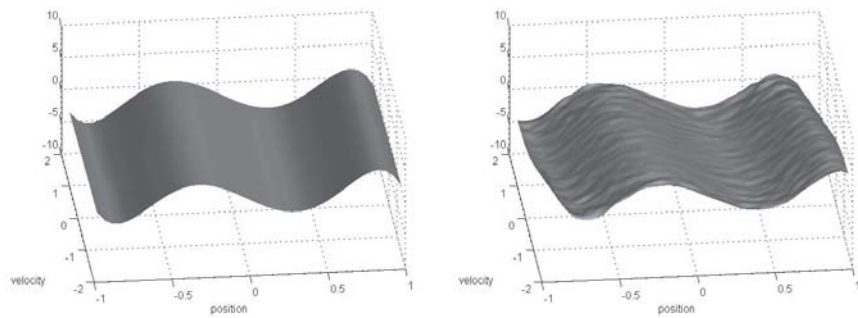


Figura 3.18: Gráfico del drift a la izquierda y de su estimación a la derecha sobre el la restricción $[-1, 1] \times [-1, 7, 1, 7]$ del dominio original D_m

Estimación del gradiente del potencial y del coeficiente de difusión

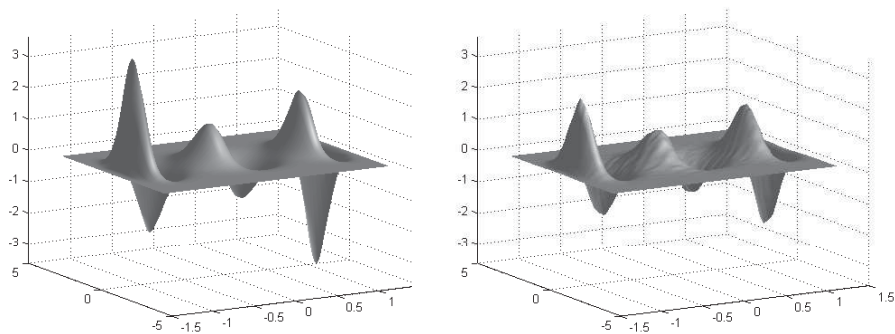


Figura 3.19: Discretización de $\nabla_x p_s(x, y)$ (izquierda), y su estimación (derecha).

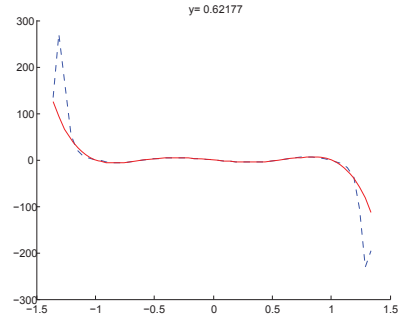
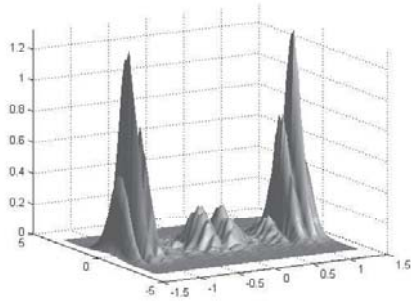


Figura 3.20: A la izquierda: Valor absoluto de la diferencia entre $\nabla_x p_s$ y su estimación. Ala derecha: Discretización de $-2V'(x)$ (línea continua) y su estimación (línea discontinua) para el valor fijo $y = 0,62177$.

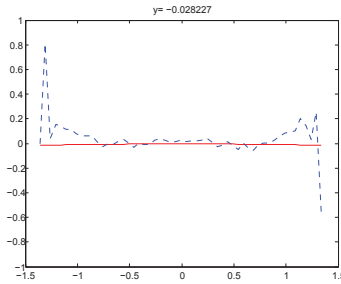
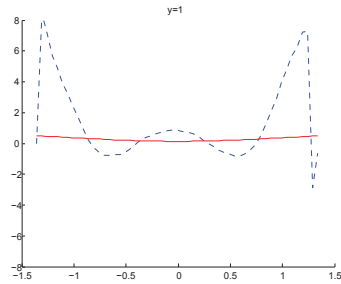


Figura 3.21: Discretización de la función $\sigma^2 y_0$, for $y_0 = 1$ (curva continua) versus su estimación (curva discontinua), y para $y = -0,028$ a la derecha. La línea continua corresponde al valor de $4y$.

Tasa de convergencia y error de estimación

Para el sistema en (3.30) nuevamente consideraremos 4 curvas de RC para analizar la convergencia de la solución aproximada a la estabilidad de la densidad invariante. También presentamos resultados del error cuadrático medio integrado relativo $RMISE$ correspondiente a la estimación de la densidad invariante.

En las figuras 3.22 y 3.23 se presentan gráficas del cálculo de RC correspondiente a aproximaciones de trayectorias de X generadas con una sucesión decreciente de valores para el paso de discretización h_n y una sucesión creciente de tamaños de muestras n . Para generar las curvas de RC se uso el mismo procedimiento que en el modelo en la sección anterior.

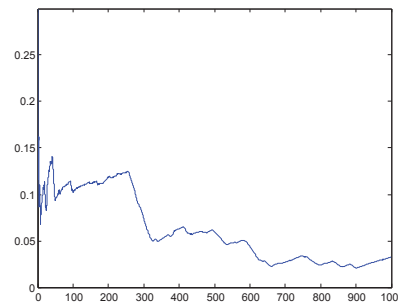
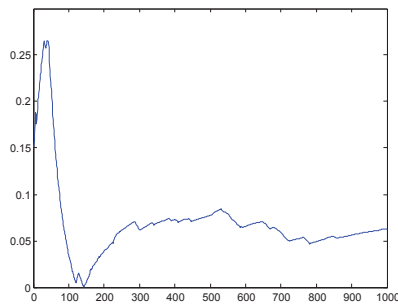


Figura 3.22: A la izquierda: RC de una trayectoria aproximada con $h_n = 0,1$ y $n = 10^4$ ($\gamma = 0,25$). A la derecha: RC de una trayectoria aproximada con $h_n = 0,01$ y $n = 10^5$ ($\gamma = 0,4$). Para ambas trayectorias el tiempo de recorrido es $T = 1000$.

Análogo a lo a los resultados obtenidos en el análisis de convergencia del modelo anterior, en las figuras 3.22 y 3.23 observamos que a pesar de disminuir el paso de discretización y de que podríamos inferir la convergencia a

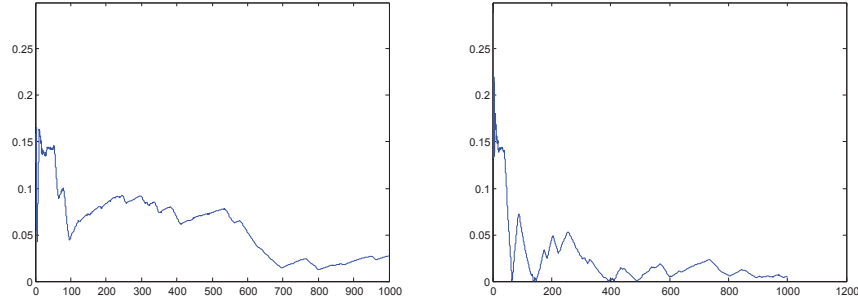


Figura 3.23: A la izquierda: RC correspondiente a una trayectoria aproximada con $h_n = 0,003$ y $n = 284800$ ($\gamma = 0,45$). A la derecha: RC correspondiente a una trayectoria aproximada con $h_n = 0,0013$ y $n = 762700$ ($\gamma = 0,49$). Para ambas trayectorias aproximadas el tiempo de recorrido es $T = 1000$.

Cuadro 3.2: Error cuadrático medio relativo integrado

n	10^3	10^4	10^5	10^6
RMISE	0,9987	0,9804	0,6114	0,0019

cero, esta no ocurre de forma exponencial. Concluimos entonces que la solución aproximada usando el algoritmo 3.1.0.3 no simula la convergencia exponencial a la densidad invariante que si verifica el proceso al que estima.

Para medir el desempeño del método de estimación para la densidad se calcula el $RMISE$ considerando 30 muestras aproximadas de la solución de (3.30) para diferentes tamaños de muestra. Estos resultados se registran en la tabla titulada: Cuadro 3.3.

Como esperamos, el error relativo decrece cuando n crece.

3.2.3. Modelo 3: Potencial periódico y coeficiente de difusión constante

En esta subsección estudiamos el sistema en (3.1) cuando $V(x) = 2 - \cos(x)$ y $\sigma(x) = 2$, es decir,

$$\begin{cases} dX_t = Y_t dt \\ dY_t = 2dB_t - (4Y_t + \sin(X_t))dt, \end{cases} \quad (3.31)$$

Este sistema verifica las hipótesis del sistema estudiado en la sección 2.2.2, son válidos entonces todos los resultados de convergencia para los estimadores de interés demostrados en el capítulo anterior.

En la primera fase de los experimentos numéricos correspondientes al sistema en (3.31) se utilizó el método de generación de trayectorias descrito durante el desarrollo de la sección 3.2.1, pero a lo largo de la ejecución de numerosas pruebas observamos que, sin importar el tamaño n de la muestra, las trayectorias generadas evidenciaban (en su mayoría) un comportamiento metastable. La metastabilidad, entre otros elementos, traía como consecuencia que al evaluar los estimadores en estas trayectorias, su desempeño no fuera adecuado.

Las figuras 3.24, 3.25 y 3.26 se presentan los gráficos correspondientes a la aproximación de una trayectoria del sistema en y y estimación de la densidad invariante:

$$p_s^\beta = C(\beta)e^{-y^2+4+2\cos(x)} \quad \text{con} \quad C(\beta) = \int_{\mathbb{R}^2} e^{-y^2+4+2\cos(x)} dx dy$$

y sus densidades marginales. Como podríamos esperar los resultados asociados a Y son regulares, el problema de estimación tiene origen en las contribuciones de X .

Traectorias con método regular estimación de la densidad invariante

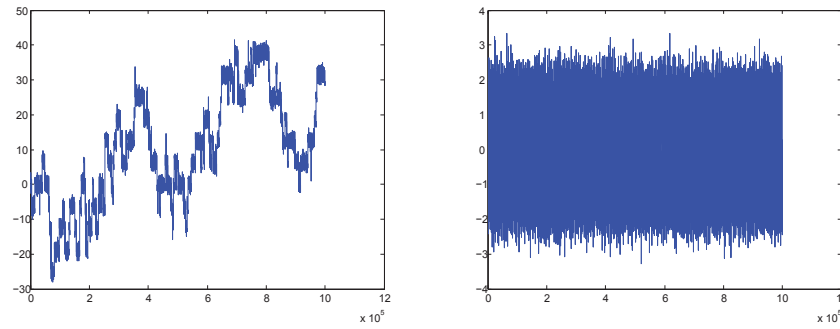


Figura 3.24: Aproximación de una trayectoria de X , a la izquierda, y de Y a la derecha.

Estimación de la densidad

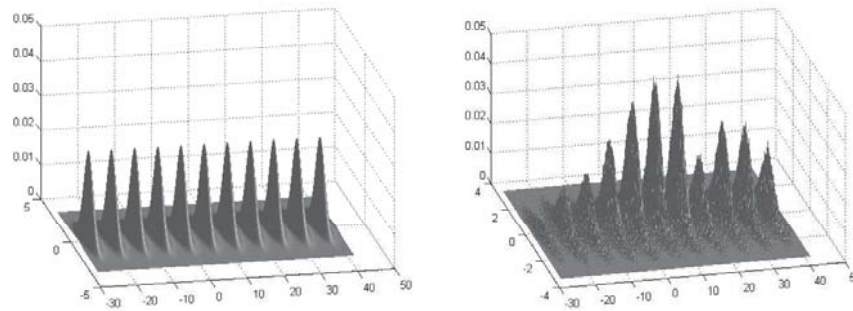


Figura 3.25: Discretización de la densidad invariante a la izquierda y su estimación a la derecha

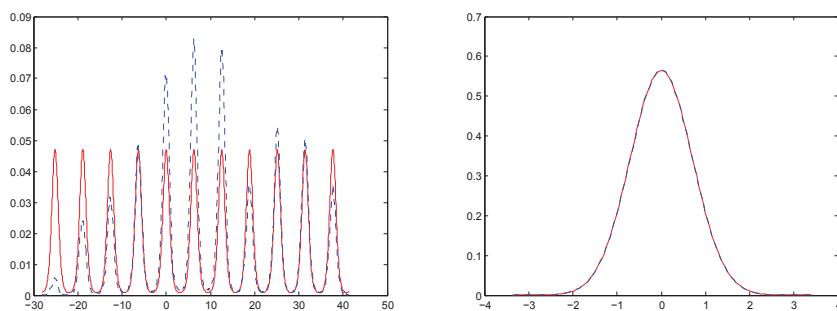


Figura 3.26: A la izquierda: densidad marginal con respecto a X de la densidad invariante (trazo continua) versus su estimación (r trazo discontinuo). A la derecha: se presenta una comparación similar entre la marginal con respecto a Y de la densidad invariante y su estimación.

3.2.4. Modelo 4: Potencial periódico período 2π y coeficiente de difusión constante

En esta subsección estudiamos el sistema en (3.31) pero, con la finalidad de corregir algunos problemas de metastabilidad ensayamos un procedimiento de corrección en la construcción de las trayectorias aproximadas que describimos brevemente a continuación.

En vista de que una posible causa del comportamiento metastable señalado en la sección anterior es la cantidad de mínimos locales que posee el potencial del sistema en (3.31), asociados a su periodicidad, decidimos hacer una modificación en el proceso de generación de trayectorias con el fin de incorporar en un sólo periodo todas las contribuciones de la trayectoria a ser evaluada por el estimador. Específicamente, una vez aproximada la trayectoria del sistema usando el procedimiento regular, cada elemento de la aproximación correspondiente a X es reemplazado por su valor correspondiente módulo 2π . El intervalo correspondiente al período principal fue $[-\pi, \pi]$. Para realizar las simulaciones correspondientes a (3.31) se usaron los mismos parámetros que el los modelos expuestos en las dos subsecciones previas.

La figura 3.27 presenta el gráfico de la trayectoria presentada en a la izquierda de la figura 3.24 luego de su transformación módulo 2π . El resto de las figuras en esta subsección presentan los resultados de las estimaciones hechas a los parámetros del sistema en (3.31).

Transformación módulo 2π de la trayectoria aproximada de X

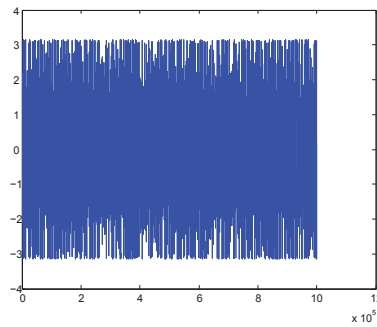


Figura 3.27: Aproximación de una trayectoria de X módulo 2π .

Estimación de la densidad

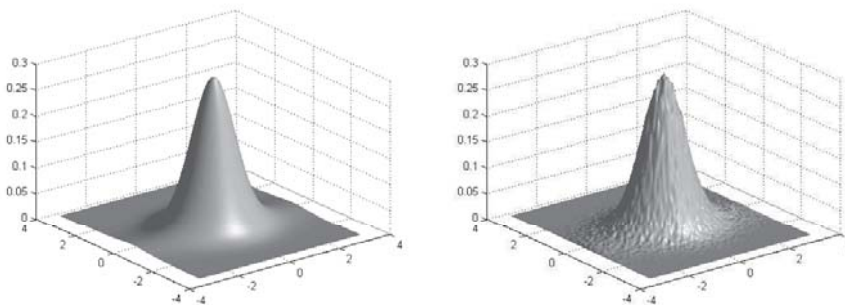


Figura 3.28: Discretización de la densidad invariante a la izquierda y su estimación a la derecha

Estimación del drift

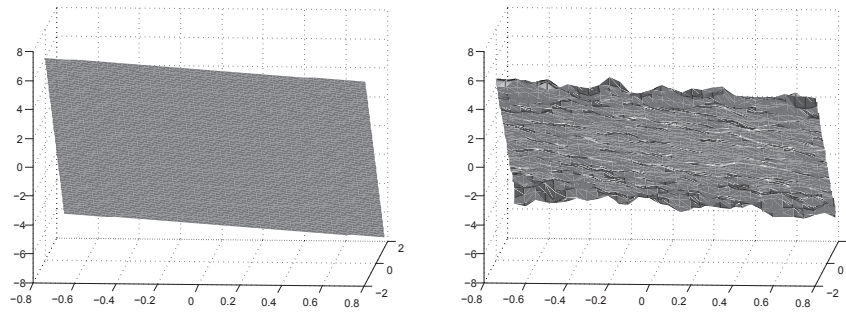


Figura 3.29: Discretización del drift (a la izquierda) y su estimación (a la derecha)

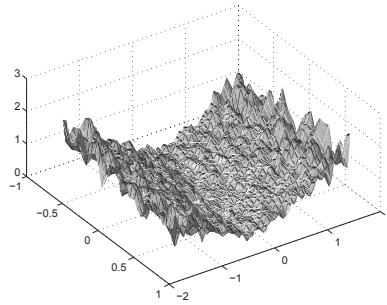


Figura 3.30: Valor absoluto de la diferencia entre el drift y su estimación calculadas sobre una discretización de $[-0,85, 0,85] \times [-1,7, 1,7]$ que es una restricción del dominio original D_m .

Estimación del gradiente del potencial y del coeficiente de difusión

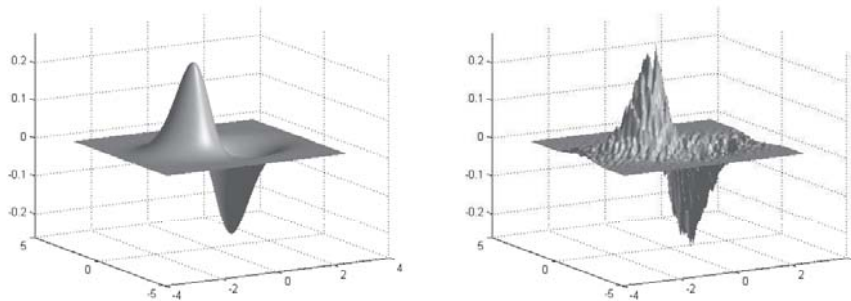


Figura 3.31: Discretización de $\nabla_x p_s(x, y)$ (izquierda), y su estimación (derecha).

Tasa de convergencia y error de estimación

Para el sistema en (3.31) sujeto a la modificación módulo 2π en su trayectoria con respecto a X , nuevamente consideraremos 4 curvas de RC para analizar la convergencia de la solución aproximada a la estabilidad de la densidad invariante. También presentamos resultados del error cuadrático medio integrado relativo $RMISE$ correspondiente a la estimación de la densidad invariante.

En las figuras 3.34 y 3.35 se presentan gráficas del cálculo de RC . En ellas observamos que el comportamiento de RC es aún más irregular que para los modelos anteriores. Para generar las curvas de RC se usó el mismo procedimiento que en los modelos anteriores. No es posible concluir convergencia exponencial a cero de RC .

Para medir el desempeño del método de estimación para la densidad se calcula el $RMISE$ considerando 30 muestras aproximadas de la solución de (3.31) para diferentes tamaños de muestra. Estos resultados se registran en la tabla titulada: Cuadro 3.3

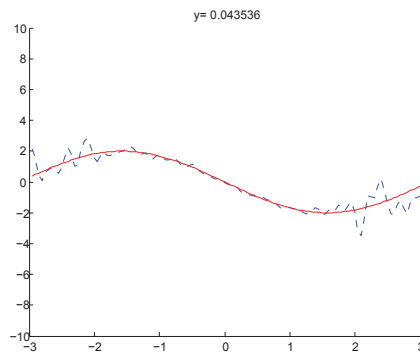


Figura 3.32: Discretización de $-2V'$ (línea continua) y su estimación (línea discontinua) para $y = 0,043$.

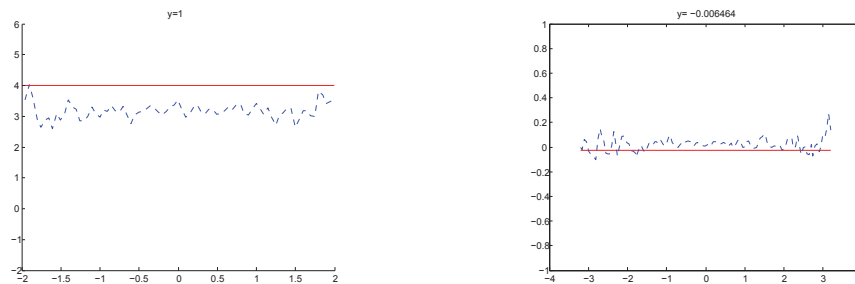


Figura 3.33: Discretización de la función $\sigma^2 y_0$, for $y_0 = 1$ (curva continua) versus su estimación (curva discontinua), y para $y = -0,0064$ a la derecha. La línea continua corresponde al valor de $4y$.

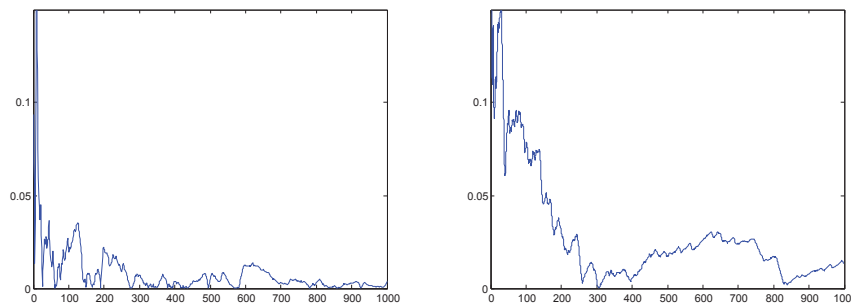


Figura 3.34: A la izquierda: RC correspondiente a una trayectoria aproximada con $h_n = 0,1$ y $n = 10^4$ ($\gamma = 0,25$). A la derecha: RC correspondiente a una trayectoria aproximada con $h_n = 0,01$ y $n = 10^5$ ($\gamma = 0,4$). Para ambas trayectorias aproximadas el tiempo de recorrido es $T = 1000$.

Cuadro 3.3: Error cuadrático medio relativo integrado

n	10^3	10^4	10^5	10^6
RMISE	0,9987	0,9804	0,6114	0,0019

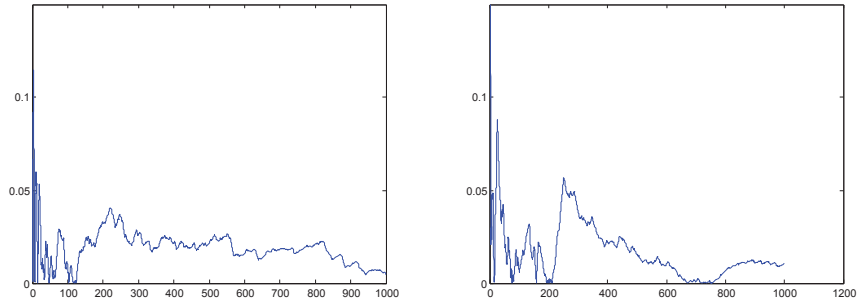


Figura 3.35: A la izquierda: RC correspondiente a una trayectoria aproximada con $h_n = 0,003$ y $n = 284800$ ($\gamma = 0,45$). A la derecha: RC correspondiente a una trayectoria aproximada con $h_n = 0,0013$ y $n = 762700$ ($\gamma = 0,49$). Para ambas trayectorias aproximadas el tiempo de recorrido es $T = 1000$.

Como esperamos, el error relativo decae cuando n crece.

Capítulo 4

Simulación de una densidad en un conjunto convexo. Aplicaciones.

Como señalamos en la introducción, este trabajo de tesis se concentra en el análisis de dos problemas de estimación, el primero fue desarrollado en los dos capítulos previos y el segundo, modelaje del transporte de contaminantes en cuerpos de agua cerrados, comenzamos a estudiarlo en este capítulo. Para ilustrar el procedimiento de aproximación que desarrollamos para el segundo problema, consideraremos datos del Lago de Valencia.

En el estudio que ahora comienza, el contaminante es concebido como una colección de partículas. De acuerdo con esta hipótesis, el recorrido del contaminante corresponde a las trayectorias de las partículas que lo constituyen. En este contexto, si la posición de cada partícula en el fluido en el instante de tiempo t es denotada por X_t , su desplazamiento ΔX_t durante el intervalo de tiempo Δt es intuitivamente consecuencia de dos contribuciones, una determinada por la velocidad del fluido, por ejemplo $b(t, X_t)$, y la otra causada por las colisiones desordenadas entre estas partículas y las moléculas correspondientes al fluido $a(t, X_t)$. Conforme al desarrollo en la subsección 1.1.2, la estructura de una ecuación diferencial estocástica estándar,

$$dX_t = b(t, X_t)dt + a(t, X_t)dB_t$$

responde, de manera natural, a la representación en lenguaje matemático del desplazamiento de partículas. En efecto, de los cuatro modelos clásicos que simulan la dispersión de contaminantes, tres son ecuaciones diferenciales estocásticas. De los modelos estocásticos, que son los que consideramos, uno es un sistema del tipo elíptico, como en (1.62)-(1.61), y los otros dos son del tipo Hipoelípticos como en (1.63). En este trabajo de tesis se consideraran dos de estos sistemas estocásticos para modelar el transporte de contaminantes durante un periodo de tiempo $[t_0, T]$ de interés. Para conseguirlo será necesario, discretizar la ecuación diferencial estocástica a utilizar e implementar esta discretización a partir de una muestra aleatoria de la distribución del contaminante en t_0 . En la práctica esta información inicial no está disponible y debido a esto debe ser también aproximada (en función de información que se tenga del cuerpo de agua en t_0).

En este capítulo nos ocuparemos de la aproximación de la distribución de inicio de observación y de la generación de sus muestras aleatorias, y en el próximo capítulo de la descripción e implementación de métodos de aproximación de trayectorias que, usando la condición inicial construída como antes, simulen la dispersión del contaminante. En lo que sigue: en la sección 4.1 se establecen elementos para simular de manera eficiente una densidad de probabilidad en un conjunto convexo $\Theta \subset \mathbb{R}^d$ (como la superficie de un lago o embalse), y en la sección 4.2 se describe la implementación de este método de simulación de densidades usando información de imágenes satelitales sobre el Lago de Valencia en Venezuela.

4.1. Simulación de una densidad en un conjunto $\Theta \subset \mathbb{R}^d$ con frontera en C^2

Lo que sigue es una adaptación del método presentado en [23] a las hipótesis que se exponen a continuación. Sea $\Theta \subset \mathbb{R}^d$ un conjunto relativamente compacto y conexo con frontera $\partial\Theta$ rectificable y tal que su parametrización

tiene dos derivadas continuas y es de medida de Lebesgue cero. Sea φ^2 una densidad en $\bar{\Theta}$, que es diferenciable y satisface $0 < \varepsilon \leq \varphi^2(x) \leq \|\varphi^2\|_\infty$ en $\bar{\Theta}$ (podemos también suponer que sólo se anula en la frontera, pero en ese caso la difusión no podrá arrancar de ese conjunto). Es posible definir la forma simétrica de Dirichlet (para una introducción a esta noción consultar [26]), que es la cerradura en $L^2(\bar{\Theta}, \mu)$ con

$$d\mu(x) = \varphi^2(x)dx, \quad (4.1)$$

por la forma bilineal simétrica

$$\mathcal{E}(f, g) = \frac{1}{2} \int_{\Theta} \langle \nabla f(x), \nabla g(x) \rangle \varphi^2(x) dx, \quad (4.2)$$

que está definida para $f, g \in \mathcal{D}$ con $\mathcal{D} = \{f \in C(\bar{\Theta}) \mid f \in W_{loc}^{1,1}(\Theta), \mathcal{E}(f, g) < \infty\}$. Dado que la función φ^2 no se anula en ningún punto de $\bar{\Theta}$ entonces la forma bilinear (4.2) con dominio \mathcal{D} se puede cerrar en $L^2(\bar{\Theta}, \mu)$ y su clausura $(\mathcal{E}^{\varphi^2}, D(\mathcal{E}^{\varphi^2}))$ es una forma de Dirichlet conservativa, regular y simétrica. Además existe un operador autoadjunto \mathfrak{L}^{φ^2} con dominio denso $D(\mathfrak{L}^{\varphi^2}) \subset L^2(\bar{\Theta}, \mu)$ que genera la forma de Dirichlet $(\mathcal{E}^{\varphi^2}, D(\mathcal{E}^{\varphi^2}))$ actuando como sigue:

$$\mathfrak{L}^{\varphi^2} f = \frac{1}{2} \Delta f + \langle \nabla(\log \varphi), \nabla f \rangle,$$

para funciones pertenecientes a $\{f \in W^{2,\infty}(\Theta) \mid \partial_\nu f(x) = 0 \forall x \in \partial\Theta\} \subset D(\mathcal{E}^{\varphi^2})$, donde ∂_ν denota la derivada con respecto a la normal exterior de $\partial\Theta$.

En efecto la forma de Dirichlet definida en (4.2) tiene diferentes clausuras. De estas clausuras dos son las más importantes, la mínima asociada a la condición de frontera de Dirichlet y la máxima asociada a la condición de frontera de Neumann. Nosotros sólo trabajaremos con la segunda.

Usando las propiedades de φ es posible definir la isometría $L^2(\bar{\Theta}, \mu) \rightarrow L^2(\bar{\Theta}, dx)$, de forma tal que $f \in L^2(\bar{\Theta}, \mu) \rightarrow g = \varphi f \in L^2(\bar{\Theta}, dx)$. De esta manera, denotando por $\mathcal{T}_t^{\varphi^2}$ al semigrupo de operadores acotados y autoadjuntos generados por $-\mathfrak{L}^{\varphi^2}$, puede ser demostrado, usando la isometría, que el semigrupo transformado, denotado por T_t actuando sobre $L^2(\bar{\Theta}, dx)$ satisface $T_t g = \varphi \mathcal{T}_t^{\varphi^2}(\varphi^{-1} g)$, para todo $g \in L^2(\bar{\Theta}, dx)$. Además, si $\mathbf{1}$ denota la función constante igual a 1, se consigue que $\mathcal{T}_t^{\varphi^2} \mathbf{1} = \mathbf{1}$. Usando la relación entre los dos semigrupos, se tiene que $T_t \varphi = \varphi$. Esto implica que la función φ es una autofunción para el generador infinitesimal A de T_t asociado al autovalor 0. Además puede ser demostrado que,

$$Ag = \mathfrak{L}^{\varphi^2}(\varphi^{-1} g) = \frac{1}{2} \Delta(\varphi^{-1} g) + \langle \nabla \log \varphi, \nabla(\varphi^{-1} g) \rangle.$$

El dominio de A es el conjunto $D(A) = \varphi D(\mathfrak{L}^{\varphi^2})$.

Ahora, para toda función continua y acotada h definida sobre $\bar{\Theta}$ y definiendo $d\mu(x) = \varphi^2(x)dx$ se consigue que

$$\langle \mathcal{T}_t^{\varphi^2}(\mu), h \rangle = \langle \mu, \mathcal{T}_t^{\varphi^2}(h) \rangle = \int_{\mathbb{R}^d} \mathcal{T}_t^{\varphi^2}(h)(x) \varphi^2(x) dx.$$

Además es necesario usar condiciones de frontera, por lo tanto usando la fórmula de Green se consigue

$$\begin{aligned} \int_{\Theta} (g \mathfrak{L}^{\varphi^2} f - f \mathfrak{L}^{\varphi^2} g) \varphi^2 dx &= - \int_{\partial\Theta} (\varphi^2(x) g \partial_\nu f - f \partial_\nu(\varphi^2(x) g) + \partial_\nu(\log \varphi^2) \varphi^2 f g) dx \\ &= - \int_{\partial\Theta} (g \partial_\nu f - f \partial_\nu g) \varphi^2 dx = 0. \end{aligned}$$

La última igualdad es consecuencia de la condición de borde. Esta propiedad es transferida sobre el semigrupo

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{T}_t^{\varphi^2}(\mu), h \rangle &= \int_{\Theta} \varphi(x) \mathcal{T}_t^{\varphi^2}(\varphi^{-1} g)(x) \varphi(x) dx \\ &= \int_{\Theta} T_t(g) \varphi(x) dx = \int_{\Theta} g(x) T_t(\varphi)(x) dx \\ &= \int_{\Theta} g(x) \varphi(x) dx = \int_{\Theta} h(x) \varphi^2(x) dx = \langle \mu, h \rangle. \end{aligned}$$

De lo anterior se obtiene que $\mathcal{T}_t^{\varphi^2}(\mu) = \mu$, demostrando así que μ es una medida invariante con respecto a $\{\mathcal{T}_t^{\varphi^2}\}_{t \geq 0}$. Además el operador \mathfrak{L}^{φ^2} es autoadjunto y, bajo las hipótesis consideradas, posee espectro discreto. Supongamos que $\alpha > 0$ y consideremos el resolvente

$$(\alpha - \mathfrak{L}^{\varphi^2})^{-1} f(x) = \int_0^\infty e^{-\alpha t} \mathcal{T}_t^{\varphi^2} f(x) dt.$$

Consideremos el Teorema XIII. 64 de [46]. Este teorema es demostrado en la referencia citada. A continuación enunciamos de este teorema solamente las afirmaciones que son de interés para nuestro desarrollo

Teorema 4.1.0.1 *Supongamos que A es un operador autoadjunto inferiormente acotado. Las siguientes afirmaciones son equivalentes:*

i) $(A - \alpha)^{-1}$ es compacto para al menos

$$\alpha \in \rho(A) = \{\alpha \in \mathbb{C} : (A - \alpha)^{-1} \text{ es acotada e inyectiva}\}.$$

ii) Existe un sistema ortonormal completo $\{\varphi_i\}_{i=0}^\infty$ en $D(A)$ tal que $A\varphi_n = \lambda_n\varphi_n$ con $\lambda_0 \leq \lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_n \dots$ y $\lambda_n \rightarrow \infty$.

Para aplicar este resultado a nuestro problema sólo es necesario demostrar que $(\alpha - \mathfrak{L}^{\varphi^2})^{-1}$ es un operador compacto definido de $L^2(\overline{\Theta}, \mu) \rightarrow L^2(\overline{\Theta}, \mu)$. Pero sabemos de la teoría general de semigrupos que $(\alpha - \mathfrak{L}^{\varphi^2})^{-1}(L^2(\overline{\Theta}, \mu)) = D(\mathfrak{L}^{\varphi^2})$. Sea u_n una sucesión de vectores acotados en $L^2(\overline{\Theta}, \mu)$ y consideremos la definición $g_n = (\alpha - \mathfrak{L}^{\varphi^2})^{-1} u_n$, entonces se tiene que

$$\|g_n\| \leq \|(\alpha - \mathfrak{L}^{\varphi^2})^{-1}\|_{op} \|u_n\| < K,$$

y además que, $\mathfrak{L}^{\varphi^2} g_n = \alpha g_n - u_n$, por lo tanto

$$\|\mathfrak{L}^{\varphi^2} g_n\| \leq \alpha \|g_n\| + \|u_n\| \leq (\|(\alpha - \mathfrak{L}^{\varphi^2})^{-1}\|_{op} + 1) \|u_n\| < 2K.$$

Definamos la norma generada por el operador \mathfrak{L}^{φ^2} como

$$\|f\|_{\mathfrak{L}^{\varphi^2}} = \|f\|_{L^2(\overline{\Theta}, \mu)} + \|\mathfrak{L}^{\varphi^2} f\|_{L^2(\overline{\Theta}, \mu)} \quad \forall f \in D(\mathfrak{L}^{\varphi^2}).$$

Dado que la función φ^2 es acotada superior e inferiormente, esta norma es equivalente a la norma del espacio de Sobolev $W^{1,2}(\overline{\Theta})$ con respecto a la medida de Lebesgue:

$$\|f\|_{W^{1,2}} = \|f\|_{L^2(\overline{\Theta}, dx)} + \left(\int_{\overline{\Theta}} \|\nabla f\|^2 dx \right)^{1/2}.$$

Esto implica que $\|g_n\|_{W^{1,2}} \leq C$ para alguna constante C . La relación $W^{1,2} \rightarrow L^2(\overline{\Theta}, dx)$ implica que existe una subsucesión g_{n_k} que converge en $L^2(\overline{\Theta}, dx)$ y también en $L^2(\overline{\Theta}, \mu)$, así la compacidad del resolvente queda demostrada.

Consideremos ahora a los autovalores $\{\lambda_i\}_{i=0}^\infty$ de \mathfrak{L}^{φ^2} , con $\lambda_0 = 0$ y las autofunciones $\{\varphi_i\}_{i=0}^\infty$. De esta forma todas las funciones $f \in L^2(\overline{\Theta}, \mu)$ pueden ser escritas como

$$f = \sum_{i=0}^\infty \langle f, \varphi_i \rangle \varphi_i.$$

Recordemos que $\varphi_0 = \mathbf{1}$, de esta forma $c_0 = \int_{\mathbb{R}^d} f(x) \varphi^2(x) dx$. Usando el teorema espectral se tiene que,

$$\mathcal{T}_t^{\varphi^2}(f)(x) = \sum_{i=0}^\infty e^{-\lambda_i t} \langle f, \varphi_i \rangle \varphi_i.$$

Esto igualmente implica la siguiente identidad

$$\left\| \mathcal{T}_t^{\varphi^2}(f) - c_0 \right\|_{L^2(\mu)} \leq e^{-2\lambda_1 t} \|f\|_{L^2(\mu)}. \quad (4.3)$$

Para justificar esta identidad, primero se sabe que cero es un autovalor y tiene multiplicidad uno debido a que la medida invariante es única. Además esto implica que $\lambda_1 > 0$.

Por otra parte, la teoría de formas de Dirichlet garantiza la existencia de un proceso de Markov $\{X_t\}_{t \geq 0}$ que toma valores en $\bar{\Theta}$ y satisface la EDE:

$$dX(t) = dB(t) + 2\nabla(\log \varphi)(X(t))dt. \quad (4.4)$$

con condiciones reflejante en la frontera y $X_0 = x \in \bar{\Theta}$.

La expresión con condición reflejante en la frontera debe ser entendida de acuerdo con Lions & Sznitman [36] como la EDE cuya solución es el proceso X_t y tiene la forma

$$dX(t) = dB(t) + 2\nabla(\log \varphi)(X(t))dt + \nu(X(t))dk(t), \quad (4.5)$$

donde $k(t)$ es el tiempo local que crece unicamente cuando X_t está en $\partial\Theta$. En efecto, la definición de este último proceso

$$k(t) = \int_0^t 1_{\partial\Theta}(X(s))d|k|(s).$$

A partir de la ecuación de Fokker-Planck asociada al operador \mathcal{L}^{φ^2} se obtiene que la densidad de transición de este proceso comenzando en $y \in \bar{\Theta}$ es:

$$\partial_t p(t, x) = \mathcal{L}^{\varphi^2} p(t, x), \quad (4.6)$$

$$\partial_\nu p(t, x) = 0, \quad \text{para todo } x \in \partial\Theta \quad \text{y} \quad (4.7)$$

$$p(0, x) = \delta_y(x) \quad \text{para } y \in \bar{\Theta}. \quad (4.8)$$

El resultado obtenido en (4.3) implica que el proceso X es ergódico y α -mixing, como en la definición 1.2.1.3 con tasa de convergencia exponencial. Además, se verifica que para cualquier función de prueba f

$$\frac{1}{t} \int_0^t f(X(u))du \xrightarrow{c.s.} \mathbb{E}[f(X_0)] = \int_{\Theta} f(x)\varphi^2(x)dx. \quad (4.9)$$

De acuerdo con lo antes expuesto, si $\{X_\Delta, X_{2\Delta}, \dots, X_{N\Delta}\}$, con $N\Delta = T$, es una muestra de $(X_t)_{t \geq 0}$ entonces,

$$\frac{1}{N\Delta} \sum_{k=1}^N f(X_{k\Delta}) \xrightarrow{c.s.} \int_{\Theta} f(x)\varphi^2(x)dx, \quad \text{cuando } N\Delta \rightarrow \infty \text{ y } \Delta \rightarrow 0$$

Sea $\{\bar{X}_{k\Delta}\}_{k \in \mathbb{N}}$ la solución de un esquema de diferencias que aproxima el proceso $\{X_t\}_{t \geq 0}$ que satisface (4.4). Se puede demostrar que $\{\bar{X}_{k\Delta}\}_{k \in \mathbb{N}}$ es una cadena de Markov y que para cada N fijo existe una medida invariante μ^N tal que:

$$\frac{1}{N\Delta} \sum_{k=1}^N f(\bar{X}_{k\Delta}) \xrightarrow{c.s.} \int_{\Theta} f(x)d\mu_N(x), \quad \text{cuando } N\Delta \rightarrow \infty \text{ y } \Delta \rightarrow 0,$$

pero, que garantía existe de que:

- 1) ¿ $\mu_n \rightarrow \mu$ en alguna distancia de medida?
- 2) ¿ $\frac{1}{N\Delta} \sum_{k=1}^N f(\bar{X}_{k\Delta}) \xrightarrow{c.s.} \int_{\Theta} f(x)d\mu(x)$, cuando $N\Delta \rightarrow \infty$ y $\Delta \rightarrow 0$?

Una solución a este problema es presentada en un artículo reciente de Cattiaux et al.[14]

4.1.1. Aproximación numérica: muestras aleatorias de distribución $d\mu(x) = \varphi^2(x)dx$.

Ahora nos concentraremos en describir un proceso que permita la generación de una muestra $\bar{X}_1, \bar{X}_2, \dots, \bar{X}_N$ con densidad φ^2 definida en un conjunto convexo Θ con frontera suave. Consideremos primero el caso en todo \mathbb{R}^d y luego se hará el ajuste para obtener la restricción a Θ . En [47] se demuestra que la difusión solución de la EDE:

$$X(t) = dB(t) + \nabla \log \varphi(X(t))dt \quad (4.10)$$

tiene como medida invariante la probabilidad $d\mu(x) = \varphi^2(x)dx$. De esta forma, para generar una muestra aproximada con distribución $d\mu(x) = \varphi^2(x)dx$ es suficiente simular la solución de la EDE en (4.10) usando un esquema numérico conveniente.

Para un sistema como el de (4.10) es conveniente usar el algoritmo de discretización Metropolis-Adjusted Langevin algorithm (*MALA*), porque, citando nuevamente el trabajo en [47], sus autores demuestran que al discretizar (4.10) usando *MALA* se obtiene una cadena de Markov con medida invariante μ . Pero como nosotros estamos interesados en aproximar φ^2 en Θ usaremos un híbrido de *MALA* expuesto en [47, sección 1.4] y el esquema de Euler simétrico en Θ expuestos en [6, sección 2.2].

A continuación se describe el algoritmo que usamos para generar una muestra $\bar{X}_1, \bar{X}_2, \dots, \bar{X}_N$ con densidad φ^2 definida en Θ .

Algoritmo 4.1.1.1 *Se considera una configuración inicial $\bar{X}_0 = x_0$ y se asume que se ha obtenido $\bar{X}_k \in \Theta$ para luego calcular la posible próxima posición X_{p1} de la muestra como una Gaussiana $N(\bar{X}_k + h\nabla \log \varphi(\bar{X}_k), hI_d)$. La propuesta X_{p1} es parcialmente aceptada con probabilidad*

$$\alpha(\bar{X}_k, X_{p1}) = 1 \wedge \frac{\varphi^2(X_{p1})q(X_{p1}, \bar{X}_k)}{\varphi^2(\bar{X}_k)q(\bar{X}_k, X_{p1})}, \quad \text{con} \quad q(u_1, u_0) = \frac{1}{(2\pi h)^{\frac{d}{2}}} e^{-\frac{1}{2h} \|u_1 - (u_0 + h\nabla \log \varphi(u_0))\|^2}, \quad (4.11)$$

donde q es la densidad de transición con la que se generó X_{p1} a partir de \bar{X}_k . Si X_{p1} es parcialmente aceptada, se fija $Xp = X_{p1}$, de lo contrario $Xp = \bar{X}_k$. Entonces,

- Si $Xp \in \Theta^c \cap V_{\partial\Theta}(r)$ con $V_{\partial\Theta}(r) = \{z \in \mathbb{R}^2 : d(z, \partial\Theta) \leq r\}$ para algún $r > 0$, definido a partir de las características de $\partial\Theta$ y el tamaño de la malla que discretiza el dominio sobre el que está definida φ^2 :

$$\bar{X}_{k+1} = Xp - 2F^\gamma(Xp)\gamma_1(Xp) \quad (4.12)$$

donde $\Gamma = (\gamma_1(z), \gamma_2(z))$ denota el vector normal interior a $\partial\Theta$ correspondiente a la proyección normal de z sobre $\partial\Theta$ para $z \in \Theta^c \cap V_{\partial\Theta}(r)$, y $F^\gamma(z)$ denota la distancia algebraica de z a $\partial\Theta$ paralela a γ .

- Si $Xp \in \Theta^c \cap V_{\partial\Theta}^c(r)$ el cálculo de Xp se reinicia.

Observación 4.1.1.2 *Análogo a lo señalado en la observación 3.1.0.4, en la práctica, el procedimiento de decisión del algoritmo anterior se ejecuta generando un número aleatorio U con distribución uniforme en $[0, 1]$ para compararlo con α definida en (4.11) como sigue: Si se verifica que*

$$U \leq \alpha(\bar{X}_k, X_{p1}), \quad (4.13)$$

entonces se fija $Xp = X_{p1}$, de lo contrario $Xp = \bar{X}_k$.

4.2. Distribución de contaminantes en el Lago de Valencia determinada por imágenes satelitales.

Como señalamos antes, consideraremos el Lago de Valencia para ilustrar el procedimiento de estimación de transporte de contaminantes en cuerpos de agua cerrados, durante un intervalo de tiempo $[t_0, T]$ usando información satelital. Es necesario entonces

- i) simular una densidad para la distribución de contaminantes en el lago usando imágenes satelitales
- ii) generar una muestra aleatoria cuya distribución tenga como densidad la generada en el punto anterior.

Luego, en el capítulo 5, usar la muestra generada en *ii*) como condición inicial del esquema elegido para aproximar el recorrido del contaminante. A continuación se describen, *i*) en la sección 4.2.1 e *ii*) en la sección 4.2.2.

4.2.1. Simulación de una densidad para la distribución de contaminantes en el lago.

Un satélite (artificial) es un instrumento de observación de la tierra constituido principalmente por sensores que fotografían la geografía de territorios específicos para monitorear el estado de los recursos terrestres. Las fotografías tomadas por el satélite son suministradas a través de imágenes de las bandas espectrales de sus sensores (once bandas en el caso del satélite *Landsat 8* que fué el satélite usado para nuestra investigación), ubicadas en la región visible (azul, verde y rojo) y en la región infrarroja (cercano, mediano o lejano). Una imagen puede ser analizada e interpretada al comparar los resultados de diferentes combinaciones espectrales.

Nosotros estamos interesados en construir una densidad φ^2 para la distribución de los desechos orgánicos del Lago de Valencia, en un instante de tiempo específico t_0 , usando la información de una imagen satelital del lago capturada en t_0 . Con este objetivo en mente y teniendo en cuenta que los componentes fundamentales de los desechos orgánicos (fósforo y nitrógeno) descargados en cuerpos de agua son los principales nutrientes de los elementos que contienen clorofila (como las algas y las plantas vasculares) [1, 22, 24, 35, 43, 45] y [53], modelaremos el transporte de desechos orgánicos en el Lago de Valencia usando la presencia de clorofila en él. La presencia de clorofila en el lago la obtendremos a través de imágenes satelitales.

Para determinar la densidad de la vegetación verde en una región, se deben observar los diferentes colores (longitudes de onda), de la luz visible y del infrarrojo cercano reflejados por las plantas. El pigmento de las hojas de las plantas, la clorofila, absorbe fuertemente la luz visible para su uso en la fotosíntesis y por otro lado la estructura celular de las hojas se refleja fuertemente cerca de la luz infrarroja. Si hay mucha más radiación reflejada en el infrarrojo cercano que en las longitudes de onda visibles, es probable que la vegetación de píxeles sea densa. Si hay poca diferencia en la intensidad de las longitudes de onda reflejadas de la luz visible y del infrarrojo cercano, la vegetación es probablemente baja. Cuando la luz solar colisiona con el objeto, ciertas longitudes de onda de este espectro se absorben y otras se reflejan. Todas las algas contienen clorofila-a, por lo tanto, la detección de estos bioindicadores sobre el lago se hace considerando la absorción de la radiación visual de este tipo de clorofila-a a través de una imagen de satélite, [3].

Con base en lo antes expuesto se construye una fórmula de diferencias para cuantificar la densidad del crecimiento de las plantas en la Tierra. El resultado de esta fórmula se denomina índice de vegetación de diferencias normalizado, es denotado por *NDVI*, y es el resultado de la siguiente operación entre las imágenes (matrices) correspondientes a las bandas espectrales del rojo visible y el infrarrojo cercano, usualmente identificadas como *B4* y *B5*, respectivamente:

$$NDVI = \frac{B5 - B4}{B5 + B4}. \quad (4.14)$$

La operación a la derecha de (4.14) tiene sentido porque las imágenes satelitales son representadas por matrices en una forma que explicaremos más adelante. Nosotros usaremos el *NDVI* para construir la densidad buscada.

Densidad de la clorofila en el lago: pasos de la construcción.

A continuación se describen los pasos para la aproximación de la densidad de la clorofila en el Lago de Valencia correspondiente al día 27 - 04 - 2014 a las 17 : 15 : 24 horas ($t_0 = 2014 - 04 - 27T17 : 15 : 24$).

- 1) Se descarga un producto *Landsat 8* correspondiente a una región rectangular que contiene al Lago de Valencia. Este producto está compuesto por 13 archivos, 11 correspondientes a la imagen capturada en cada una de las bandas espectrales, una imagen de calidad usada para la evaluación y control de calidad de la

imagen, y un archivo de texto llamado metadatos que contiene información específica de la imagen como: su fecha de captura, sus valores de reflectancia y radiancia, nombre del sensor que la capturó, etc. Conforme a la información del archivo de metadatos, el instante de tiempo de captura de este producto es $t_0 = 2014 - 04 - 27, T 17 : 15 : 24$.

- 2) Cada imagen es representada por una matriz cuyas entradas (niveles digitales) corresponden a los valores de una discretización de la superficie capturada. La matriz correspondiente a la banda 6 (B_6) es recortada luego usada para identificar con precisión los límites del Lago de Valencia. Específicamente, se crea una máscara a partir de B_6 , convirtiendo en 1 a los niveles digitales identificados como agua del lago y 0 al resto de los niveles digitales. Las matrices de las bandas 4 y 5 (B_4 y B_5 respectivamente) son recortadas igual que B_6 y los límites del lago en ellas también son identificados de acuerdo con la máscara creada a partir de B_6 . A la izquierda de la figura 4.1 se muestra la imagen correspondiente a B_6 descargada, y a la derecha de la misma figura se muestra la imagen de B_6 luego de ser recortada. También, a la izquierda en la figura 4.2 se muestra la máscara creada a partir de B_6 .
- 3) En la práctica, antes de calcular el $NDVI$ definido en (4.14) es necesario hacer una conversión radiométrica a las matrices B_4 y B_5 correspondientes a las bandas 4 y 5 de la imagen satelital. Esto se debe a que los niveles digitales de las bandas de la imagen capturada son registrados en formato no cifrado y deben ser llevados a unidades de reflectancia usando las ecuaciones:

$$B_{4R} = M_R B_4 + A_R \quad \text{y} \quad B_{5R} = M_R B_5 + A_R, \quad (4.15)$$

donde M_R y A_R son conocidos como factor multiplicativo y aditivo respectivamente, de reescalamiento a unidades de reflectancia, estos valores se encuentran registrados en el archivo de metadatos de la imagen satelital. Una vez reescalados los niveles digitales de B_4 y B_5 se calcula $NDVI$ sustituyendo B_4 y B_5 por B_{4R} y B_{5R} en la ecuación (4.14). La figura 4.2 contiene a su derecha la representación gráfica de la imagen correspondiente al cálculo del $NDVI$.

La matriz $NDVI$ obtenida mide el índice de vegetación en una discretización rectangular de la región \mathcal{R} mostrada en la figura 4.2 la cual contiene la superficie del Lago de Valencia Ω . Esta matriz determina un sistema de coordenadas sobre \mathcal{R} considerando cada par de índices (i, j) de $NDVI$ como la coordenada del punto $(x, y) \in \mathbb{R}$ donde $NDVI(i, j)$ fue calculado.

Para este trabajo sólo fueron consideradas las partículas de clorofila que estaban en el interior de la superficie del lago, las partículas sobre el borde del lago fueron descartadas.

- 4) Se usan los valores entre 0 y 1 del $NDVI$ para determinar el subconjunto Θ of $\Omega \setminus \partial\Omega$ caracterizado por la presencia de clorofila, porque estos valores de $NDVI$ indican la presencia de clorofila en las posiciones donde ellos fueron calculados. En realidad la información proporcionada por $NDVI$ solo permite identificar los nodos (i, j) de la malla correspondiente a la imagen satelital tal que $NDVI(i, j) \in (0, 1)$, entonces, se asume que Θ está formada por las celdas a cuyos nodos ubicados en la esquina inferior izquierda les corresponden valores de $NDVI$ entre 0 and 1. De acuerdo con la última suposición Θ es una colección de subconjuntos convexos de \mathcal{D} . En la figura 4.3) se puede observar el conjunto Θ .
- 5) A partir de $NDVI$ se construye $\varphi^2 : \Theta \rightarrow \mathbb{R}$ por

$$\varphi^2(i, j) = \frac{NDVI(i, j)}{\sum_A NDVI(i, j)}, \quad (4.16)$$

con $A = \{(i, j) : NDVI(i, j) \in (0, 1)\}$, para los nodos (i, j) de la malla correspondiente a la imagen satelital, que están contenidos en Θ , y por interpolación lineal para el resto de los puntos en Θ . Interpretamos φ^2 como la densidad de la distribución de probabilidad que mide las proporciones de clorofila en el lago, para el instante t_0 en el cual la imagen fue capturada.

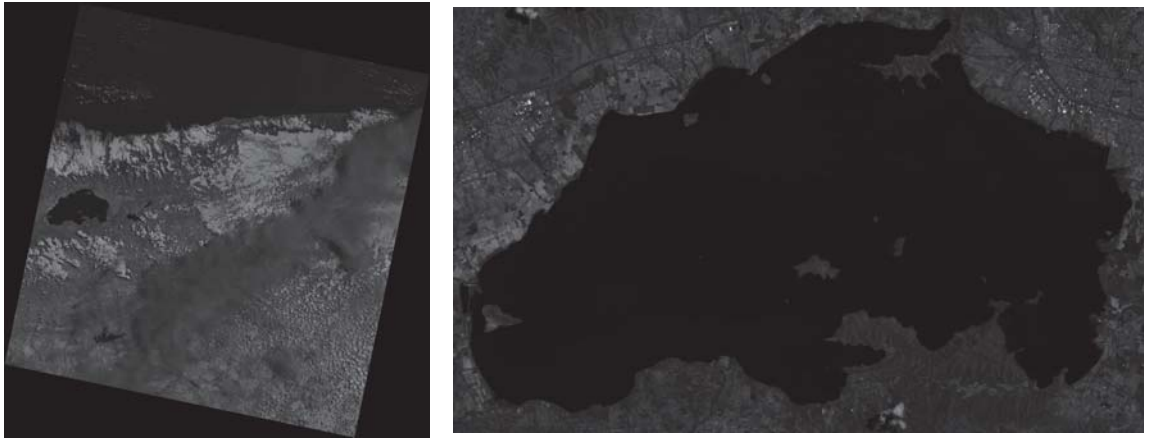


Figura 4.1: A la izquierda está B_6 capturada en t_0 y a la derecha aparece recortada.



Figura 4.2: A la izquierda máscara creada a partir de B_6 y a la derecha gráfica del $NDVI$ en t_0 .

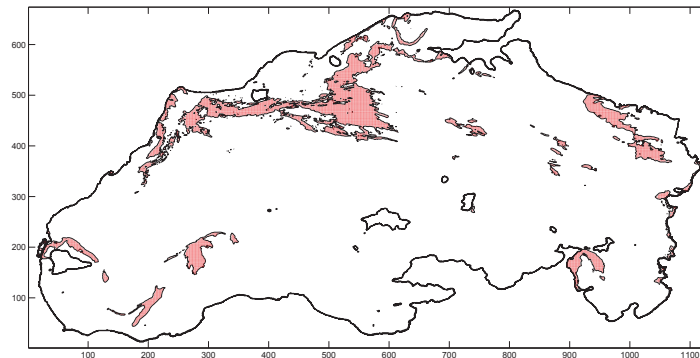


Figura 4.3: Conjuntos convexos determinados por la presencia de clorofila en el Lago de Valencia.

4.2.2. Generación de muestras aleatorias.

En esta parte aplicaremos los resultados obtenidos en la sección 4.1. Entonces, para generar una muestra aleatoria con la densidad φ^2 definida por (4.16) en la subsección anterior, aproximamos la ecuación diferencial

$$d\mathbf{X}_t = d\mathbf{B}_t + \frac{1}{2} \nabla \log(\varphi(\mathbf{X}_t)) dt, \quad t \geq t_0, \quad (4.17)$$

donde \mathbf{B}_t es un movimiento Browniano bidimensional, usando el algoritmo 4.1.1.1. Este algoritmo aproxima la ecuación diferencial en (4.17) usando una versión Metropolizada del esquema de Euler (MALA), con rebote simétrico en la frontera $\partial\Theta$ (ver [6] y [47]). El procedimiento específico es como sigue:

- 1) Por cada subconjunto convexo de $\Theta_i \subset \Theta$ mostrado en la figura 4.3, es elegido un punto $x_0 \in \Theta_i$ a partir del cual, usando el algoritmo 4.1.1.1, se genera una aproximación $\bar{X}_1^i, \dots, \bar{X}_N^i$ de la difusión X_t que resuelve la EDE en (4.17).
- 2) De cada muestra $\bar{X}_1^i, \dots, \bar{X}_N^i$ se selecciona una submuestra $(L_k^i)_{k=1}^n$ definida por $L_k^i = \bar{X}_{k \times NC}^i$ para $k = 1, \dots, n$ y $N = n \times NC$. La submuestra $(L_k^i)_{k=1}^n$ espaciada por un número fijo de pasos de tiempo NC se construye con el fin de garantizar la selección de una muestra aproximadamente independiente. El parámetro NC , conocido como longitud de correlación, está definido en la sección 3.1.
- 3) Con todos los puntos que se acaban de construir se forma una gran muestra aleatoria:

$$(L_1, L_2, \dots, L_{n \times m}) = (L_1^1, \dots, L_n^1, L_1^2, \dots, L_n^2, \dots, L_1^m, \dots, L_n^m) \quad (4.18)$$

donde m denota el número de subconjuntos convexos Θ_i que forman Θ .

La muestra $(L_1, L_2, \dots, L_{n \times m})$ que se acaba de construir es una colección de pares aleatorios en \mathbb{R}^2 , aproximadamente independientes con densidad φ^2 . En el próximo capítulo la muestra $(L_1, L_2, \dots, L_{n \times m})$ será usada como condición inicial de dos esquemas que modelarán el transporte de contaminantes en el Lago de Valencia.

La implementación del procedimiento descrito en 1), 2) y 3), usando imágenes del Lago de Valencia capturadas en $t_0 = 2014-04-27T17:15:24$ para construir φ^2 definido en (4.16), y considerando $m = 10$ (se seleccionaron 10 subconjuntos convexos Θ_i más grandes de Θ mostrado en la figura 4.3), $NC = 50$ y $n = 30$, dió como resultado una muestra de 15000 pares aleatorios que se muestran en la figura 4.4.

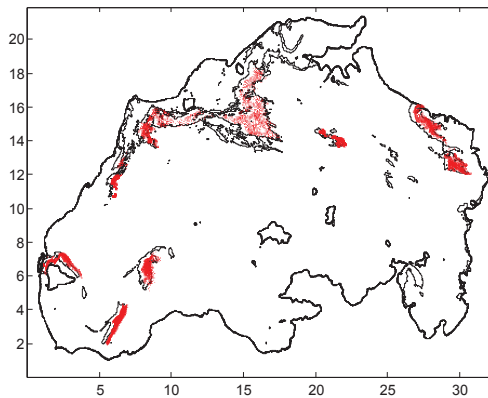


Figura 4.4: Pares aleatorios con distribución $d\mu(x) = \varphi^2(x) dx$.

Capítulo 5

Dispersión de contaminantes en cuerpos de agua cerrados.

Este capítulo concluye el estudio de transporte de contaminantes en cuerpos de agua cerrados que comenzó en el capítulo 4 con la aproximación de densidades en conjuntos convexos de \mathbb{R}^d . Corresponde entonces, en este capítulo, describir modelos que aproximen el desplazamiento de desechos orgánicos, determinados por una distribución inicial, y presentar resultados experimentales de la ejecución del modelo completo que proponemos, usando datos del Lago de Valencia en Venezuela.

En este capítulo nos concentramos en cuerpos de aguas cerrados cuya escala de longitud vertical es más pequeña que la horizontal y asumimos que el contaminante en este cuerpo de agua es una colección de partículas sobre su superficie. La ecuación de advección-difusión, el modelo paseo aleatorio y el modelo vuelo aleatorio son los modelos clásicos utilizados para describir la dispersión de partículas en aguas poco profundas. Los tres modelos se basan en la idea de que el desplazamiento de contaminantes es causado por la velocidad del fluido (advección), y por las colisiones de las partículas del contaminante con las moléculas que están constantemente moviéndose en el fluido (difusión). El primero es un modelo determinístico que combina la ley de Fick, la ley de conservación de la masa y ecuación de advección para determinar la concentración del contaminante, y los dos últimos son modelos estocásticos que determinan las trayectorias, en el fluido, de cada una de las partículas del contaminante.

Interpretando la ecuación de advección-difusión como una ecuación de Fokker-Plank es posible demostrar la consistencia entre paseo aleatorio y la ecuación de advección-difusión. Estos modelos describen con precisión la dispersión de partículas si estas han estado en el flujo más de una escala de tiempo Lagrangiana y se han propagado hasta cubrir una distancia superior a la escala más grande del flujo de fluido turbulento, [25]. El modelo vuelo aleatorio corrige este defecto modificando el término de difusión de paseo aleatorio. Esta modificación permite una descripción precisa del transporte de contaminantes durante un periodo corto de tiempo después del despliegue de las partículas y se puede demostrar que, luego de largos periodos de simulación, este modelo también es consistente con la ecuación de advección-difusión, [30].

Nosotros aplicamos los métodos aleatorios antes señalados. La definición de paseo aleatorio se basa en un sistema de *EDEs* del tipo elíptica:

$$dX_t = b(t, X_t)dt + a(t, X_t)dB_t, \quad (5.1)$$

donde $b(t, x)$ y $a(t, x)$ son interpretados como la velocidad y el coeficiente de difusión del fluido respectivamente, y la definición de vuelo aleatorio introduce una corrección en el término de difusión de la ecuación (5.1). Ambos modelos son complementados con una versión de la condición de frontera de Neumann para *EDEs*, para así garantizar que no haya transferencia de partículas a través de la frontera del fluido.

La información explícita de b , a y de la batimetría no está disponible, es necesario entonces simular estos elementos. La velocidad b es simulada usando un modelo hidrodinámico determinado por las ecuaciones de Saint-Venant, también conocidas como ecuaciones de aguas poco profundas, el coeficiente de difusión a generalmente se determina de forma experimental y la batimetría se aproxima usando información parcial que se posee.

En resumen, este capítulo se desarrolla como sigue, en la subsección 5.1 son descritos de forma intuitiva los

modelos paseo aleatorio, vuelo aleatorio y el modelo hidrodinámico determinado por las ecuaciones de aguas poco profundas, adicionalmente, por cada modelo se describe el método numérico empleado para su aproximación; finalmente en la sección 5.2 se describe la implementación de estos modelos usando datos del Lago de Valencia en Venezuela. Específicamente, en esta última sección, se estudia el comportamiento de los modelos estocásticos ejecutándolos con el flujo adventivo del Lago de Valencia aproximado en [49], y con dos tipos de distribuciones iniciales: distribución inicial concentrada en punto y distribución de la clorofila en el Lago de Valencia con la finalidad de analizar la dispersión de esta sustancia en el lago.

5.1. Modelos de aproximación para el desplazamiento del contaminante.

En esta sección se describen 3 de los modelos de aproximación que intervienen en el modelado de transporte de contaminantes: modelo hidrodinámico, modelo paseo aleatorio y modelo vuelo aleatorio. Adicionalmente, por cada modelo se describe el esquema numérico considerado para su implementación.

5.1.1. Modelo hidrodinámico: Ecuaciones de Saint Venant.

Las ecuaciones de Saint Venant modelan la velocidad de un cuerpo de agua "poco profundo". Para un fluido con escala de longitud horizontal superior a la vertical, las leyes de conservación de la masa y del momento aseguran que la velocidad vertical es suficientemente pequeña y constante a lo largo de la profundidad del cuerpo de agua considerado. Bajo estas condiciones es posible eliminar los términos de la velocidad vertical del fluido que aparecen en las ecuaciones de Navier Stokes descritas en [15, sección 1.3] y obtener las ecuaciones de Saint Venant que siguen:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} H \\ \mathbf{u}H \\ \mathbf{v}H \end{pmatrix} + \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} \mathbf{u}H \\ \mathbf{v}^2H + gH^2/2 \\ \mathbf{u}\mathbf{v}H \end{pmatrix} + \frac{\partial}{\partial y} \begin{pmatrix} \mathbf{v}H \\ \mathbf{u}\mathbf{v}H \\ \mathbf{v}^2H + gH^2/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -gH \frac{\partial b}{\partial x} + \epsilon \Delta(H\mathbf{u}) + \rho^{-1} \tau_x \\ -gH \frac{\partial b}{\partial y} + \epsilon \Delta(H\mathbf{v}) + \rho^{-1} \tau_y \end{pmatrix}, \quad (5.2)$$

donde $H = H(x, y, t)$ es la profundidad, $\mathbf{u}(x, y)$ y $\mathbf{v}(x, y)$ son las velocidades horizontales del fluido promediadas en función H y $b = b(x, y)$ es la batimetría, la cual es positiva medida desde el geoide hacia abajo. Usualmente la profundidad H es definida como $H = b + \eta$, donde $\eta = \eta(x, y, t)$ representa la elevación de la superficie libre relativa al geoide. Cuando $\eta = 0$, la profundidad H no depende de t , es decir, $H = H(x, y)$.

También forman parte del modelo los siguientes parámetros: g es la gravedad, $\tau_x = \tau_{w_x} - \tau_{s_x}$ y $\tau_y = \tau_{w_y} - \tau_{s_y}$ determinan los esfuerzos cortantes con τ_{w_x} , τ_{w_y} los esfuerzos cortantes de la corriente en el fondo del lago y τ_{s_x} , τ_{s_y} los esfuerzos cortantes del viento sobre la superficie del lago en las direcciones x e y , respectivamente, ρ es la densidad, ϵ es un parámetro de viscosidad o de regularización y Δ es el Laplaciano [27], [48].

Estas ecuaciones diferenciales deben resolverse con un apropiado conjunto de condiciones iniciales y de borde. Se introducen condiciones iniciales para las velocidades (u, v) y la profundidad H en todo el campo de cálculo para el instante de tiempo inicial ($t = 0$): $u(x, y, 0) = u_0(x, y)$, $v(x, y, 0) = v_0(x, y)$ y $H(x, y, 0) = H_0(x, y)$. Usualmente estos valores se conocen a priori o es necesario estimar valores físicamente realistas en base a la experiencia. Las condiciones de borde son cerradas y delimitan el campo de cálculo hasta donde la superficie del agua está en contacto con la tierra. Este tipo de condición de borde es llamada algunas veces condición de impermeabilidad, y se interpreta como una velocidad normal nula respecto a la normal en borde que define la región de integración. Sin embargo, cuando el parámetro de viscosidad es no nulo, lo cual hace que esta formulación de las ecuaciones de Saint-Venant (5.2), se vuelven ligeramente parabólicas (esta condición fué considerado en la implementación sobre el Lago de Valencia en [49]). En consecuencia, se hace necesario cambiar o suplementar la condición de borde

de impermeabilidad con la velocidad nula, referida algunas veces como condición de no deslizamiento. La combinación de las ecuaciones, las condiciones iniciales y las condiciones de borde descritas producen un problema matemáticamente bien planteado, el cual fue discretizado mediante el método de diferencia finitas en [27].

La ecuación (5.2) se puede reescribir de la forma

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial y} = S, \quad \text{con } U = \begin{pmatrix} H \\ u \\ v \end{pmatrix} \quad \text{para } \begin{cases} u = \mathbf{u}H \\ v = \mathbf{v}H \end{cases}, \quad (5.3)$$

$$F = \mathbf{u}U + \begin{pmatrix} 0 \\ gH^2/2 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad G = \mathbf{v}U + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ gH^2/2 \end{pmatrix}, \quad \text{y } S = \epsilon\Delta U + \begin{pmatrix} 0 \\ -gH\frac{\partial b}{\partial x} + \epsilon\Delta(H\mathbf{u}) + \rho^{-1}\tau_x \\ -gH\frac{\partial b}{\partial y} + \epsilon\Delta(H\mathbf{v}) + \rho^{-1}\tau_y \end{pmatrix}. \quad (5.4)$$

De acuerdo con esta representación, la solución de la ecuaciones de Saint Venant es la función:

$$(u, v) : \mathcal{D} \subset \mathbb{R}^2 \longrightarrow \mathbb{R}^2 \quad (5.5)$$

$$(x, y) \longrightarrow (u(x, y), v(x, y)),,$$

determinada por \mathbf{u} , \mathbf{v} y H como se define en (5.4), donde $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ modela la superficie del medio de agua de interés.

Las ecuaciones de Saint-Venant constituyen un sistema no lineal cuya solución analítica sólo es posible para casos muy sencillos, es necesario entonces utilizar métodos numéricos para aproximar sus soluciones. El esquema numérico genera aproximaciones de u y v en una discretización rectangular de una región del plano \mathcal{R} ($\mathcal{D} \subset \mathcal{R}$):

$$x_i = x_0 + i \times \Delta x \quad \text{y} \quad y_j = y_0 + j \times \Delta y \quad \text{para } i = 0, 1, \dots, n_x \quad \text{y} \quad j = 0, 1, \dots, n_y. \quad (5.6)$$

donde también deben estar definida H y todas las variables dependientes en (5.3)- (5.4).

Aproximación numérica: Ecuaciones de Saint Venant

La aproximación numérica que se considera en este trabajo es una adaptación del esquema de diferencias finitas a pasos fraccionados desarrollado en [37]. La aproximación se basa en un esquema que permite subdividir un operador en diferencias finitas en una serie de operadores mas simples que, aplicado al modelo hidrodinámico, combina el método de MacCormack para la parte hiperbólica, una discretización de segundo orden para la parte elíptica y una corrección TVD. A continuación se presenta un bosquejo de este método numérico, que fue desarrollado en [49].

Algoritmo 5.1.1.1 *Dadas las condiciones iniciales $u(x, y, 0) = u_0(x, y)$, $v(x, y, 0) = v_0(x, y)$ y $H(x, y, 0) = H_0(x, y)$ para (x, y) en la discretización definida en (5.6), se aproxima la solución de (5.3) – (5.4) como sigue:*

- *Paso predictor:*

$$U_i^* = U_i^k - \frac{\Delta t}{\Delta x} (F_i^k - F_{i-1}^k) - \frac{\Delta t}{\Delta y} (G_i^k - G_{i-1}^k) + S_i^k \Delta t, \quad (5.7)$$

- *Paso corrector:*

$$U_i^{**} = \frac{U_i^k - U_i^*}{2} - \frac{\Delta t}{2\Delta x} (F_{i+1}^* - F_i^*) - \frac{\Delta t}{2\Delta y} (G_{i+1}^* - G_i^*) + S_i^* \frac{\Delta t}{2}, \quad (5.8)$$

- *Paso TVD:*

$$U_i^{k+1} = U_i^{**} + (\Phi_{i+1/2} - \Phi_{i-1/2}), \quad \text{donde } \Phi \text{ es el corrector de flujo.} \quad (5.9)$$

En (5.7)-(5.9) Δx , Δy y Δt definen los intervalos en espacio y tiempo, respectivamente, y Δt verifica:

$$\Delta t \leq \min \left[\left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} \right)^{-1/2} (gH)^{-1/2} \right]. \quad (5.10)$$

Este es un esquema numérico de segundo orden en tiempo y espacio, $O(\Delta t) + O(\Delta x)$, y no tiene efectos dispersivos. Además, es un esquema explícito, lo que evita el costo de la evaluación del jacobiano, reduciendo tiempo de cálculo. La condición (5.10) garantiza la estabilidad del esquema.

En la figura 5.1 se puede observar una representación gráfica del campo vectorial de las velocidades horizontales que satisfacen las ecuaciones de Saint Venant en (5.5) correspondiente a datos del Lago de Valencia.

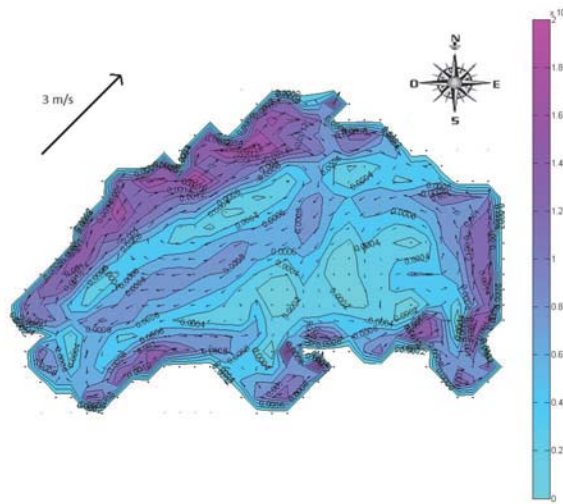


Figura 5.1: Magnitud de la velocidad de la corriente sobre la superficie del Lago de Valencia

5.1.2. Modelo estocástico paseo aleatorio

En la subsección anterior se describió el modelo hidrodinámico por medio del cual se aproxima la velocidad de un cuerpo de agua cerrado y poco profundo, como es el caso de algunos lagos o embalses. El hecho de que los cuerpos de agua considerados sean poco profundos implica que la aproximación de las velocidades en la superficie del fluido sea suficiente para modelar los procesos de transporte de sustancias que se llevan a cabo en el mismo. Tiene sentido entonces interpretar al contaminante como una colección de partículas que se mueven en la superficie del medio de agua y describir su movimiento, de forma explícita, como la suma del impulso causado por velocidad del cuerpo de agua más el impulso causado por su coeficiente de difusión. La exposición anterior corresponde a la definición formal de los modelos estocásticos, pero también es posible describirlos a partir de una interpretación probabilística de la ecuación de advección-difusión. Esta interpretación garantiza la consistencia entre el modelo determinístico y los modelos estocásticos. A continuación se describe esta consistencia y luego se define formalmente el modelo paseo aleatorio compuesto con una versión de la condición de frontera de Newmann para modelos estocásticos.

La solución de la ecuación de advección-difusión con profundidad integrada:

$$\frac{\partial(HC)}{\partial t} + \frac{\partial(CuH)}{\partial x} + \frac{\partial(CvH)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(HD \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(HD \frac{\partial C}{\partial y} \right), \quad (5.11)$$

modela la concentración $C(x, y, t)$ de partículas en un cuerpo de agua con: profundidad $H(x, y)$, velocidad (u, v) sobre su superficie, y coeficiente de difusión D . Este modelo ha sido tradicionalmente usado para modelar el transporte de contaminantes porque responde a leyes fundamentales de las ciencias naturales como la ley de Fick, la ley de conservación de la masa y la ecuación de advección. La concentración C que satisface (5.11) está asociada

con la densidad $p(x, y, t)$ correspondiente a la distribución de partículas en la superficie del cuerpo de agua, por la identidad

$$C(x, y, t) = \frac{p(x, y, t)}{H(x, y)}. \quad (5.12)$$

Sustituyendo (5.12) en la ecuación (5.11), se obtiene la ecuación de Fokker-Planck:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(\left[u + \left(\frac{\partial H}{\partial x} D \right) \frac{1}{H} + \frac{\partial D}{\partial x} \right] p \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\left[v + \left(\frac{\partial H}{\partial y} D \right) \frac{1}{H} + \frac{\partial D}{\partial y} \right] p \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (2D p) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} (2D p). \quad (5.13)$$

La ecuación diferencial (5.13) con condición inicial $p(x, y, t_0) = \delta(x - x_0)\delta(y - y_0)$ coincide con la forward Kolmogorov equation. La solución de esta ecuación de Kolmogorov es la densidad de la transición de probabilidad del proceso de Markov $\{(X_t, Y_t)\}_{t \geq t_0}$ que representa la posición de las partículas sobre la superficie del cuerpo de agua en estudio y satisface la EDE:

$$dX_t = \left[u + \left(D \frac{\partial H}{\partial x} \right) \frac{1}{H} + \frac{\partial D}{\partial x} \right] dt + \sqrt{2D} dB_t^1, \quad (5.14)$$

$$dY_t = \left[v + \left(D \frac{\partial H}{\partial y} \right) \frac{1}{H} + \frac{\partial D}{\partial y} \right] dt + \sqrt{2D} dB_t^2, \quad (5.15)$$

donde $t \geq t_0$, $X_{t_0} = x_0$, $Y_{t_0} = y_0$, $(x_0, y_0) \in \mathbb{R}^2$ and $\mathbf{W}_t = (W_t^1, W_t^2)^T$ es un movimiento Browniano bidimensional que verifica :

$$\mathbf{E}(d\mathbf{W}_t, d\mathbf{W}_t^T) = I dt, \quad (5.16)$$

ver [31]. De acuerdo con lo anterior la distribución de la difusión (X_t, Y_t) coincide con la distribución de las partículas cuya concentración $C(x, y, t)$ satisface la ecuación de advección-difusión, esto prueba la consistencia entre los dos modelos y justifica el uso de las trayectorias de $\{(X_t, Y_t)\}_{t \geq t_0}$ para simular el recorrido de cada partícula del contaminante.

Formalmente, el modelo de paseo aleatorio asocia a cada partícula del contaminante inyectada en un instante de tiempo $t = t_0$, en el punto (x_0, y_0) de la superficie del medio de agua en estudio, una trayectoria de la difusión $\{(X_t, Y_t)\}_{t \geq t_0}$ con condición inicial $(X_{t_0}, Y_{t_0}) = (x_0, y_0)$.

Cuando la superficie \mathcal{D} del cuerpo de agua considerado tiene borde cerrado $\partial\mathcal{D}$, las condiciones de frontera de Newmann $\nabla C \cdot \mathbf{n} = \partial C / \partial \mathbf{n} = 0$, correspondientes a la ecuación de advección-difusión es usada para simular el hecho de que no hay transferencia de partículas a través de la frontera, esto quiere decir que, cualquier partícula que cruce la frontera será devuelta al dominio del fluido para garantizar de esta manera la que se cumpla la ley de conservación de la masa.

Para el modelo paseo aleatorio, la condición de Newmann correspondiente es incorporada a las EDEs (5.14)-(5.15) en forma de término de reflexión como sigue:

$$dX_t = \left[u + \left(D \frac{\partial H}{\partial x} \right) \frac{1}{H} + \frac{\partial D}{\partial x} \right] dt + \sqrt{2D} dB_t^1 + \gamma_1 dk_t, \quad (5.17)$$

$$dY_t = \left[v + \left(D \frac{\partial H}{\partial y} \right) \frac{1}{H} + \frac{\partial D}{\partial y} \right] dt + \sqrt{2D} dB_t^2 + \gamma_2 dk_t, \quad (5.18)$$

donde $t \geq t_0$, $X_{t_0} = x_0$, $Y_{t_0} = y_0$ y $\gamma = (\gamma_1, \gamma_2)$ es un campo vectorial normalizado a 1 que define la dirección de la reflexión y $\{k_t\}_t$ es un proceso que crece únicamente cuando (X_t, Y_t) está sobre $\partial\mathcal{D}$: $k_t = \int_0^t 1_{\{(X_s, Y_s) \in \partial\mathcal{D}\}} dk_s$. El proceso $\{k_t\}_t$ determina el tamaño de la reflexión (see [6]).

Aproximación numérica: Modelo paseo aleatorio

Para aproximar el transporte de contaminantes en un cuerpo de agua cerrado usando el modelo paseo aleatorio, se consideran N partículas cuyas posiciones, sobre la representación en el plano \mathcal{D} de la superficie del medio de agua en estudio, se supone que coinciden con las de una muestra aleatoria $((x_0^1, y_0^1), \dots, (x_0^N, y_0^N))$, de pares ordenados distribuidos como una condición inicial dato X_0 (que modela la disposición de las partículas al inicio de la observación del desplazamiento del contaminante, identificado por t_0). El recorrido de las partículas es simulado

por las trayectorias que se obtienen con la implementación del esquema de Euler correspondiente a (5.17)-(5.18) con origen en las posiciones $((x_0^1, y_0^1), \dots, (x_0^N, y_0^N))$ de las partículas. Este esquema de Euler con reflexión simétrica en la frontera es desarrollado [6]. Allí se demuestra que el esquema tiene una tasa de convergencia débil de orden uno con respecto al paso de tiempo Δt .

A continuación, se bosqueja el procedimiento de simulación para cada partícula.

Algoritmo 5.1.2.1 Comenzamos con $(\hat{X}_{t_0}, \hat{Y}_{t_0}) = (x_0^i, y_0^i) \in \mathcal{D} \subset \mathbb{R}^2$ para $i = 1, \dots, N$ y luego,

- 1) se asume haber obtenido la aproximación $(\hat{X}_{t_k}, \hat{Y}_{t_k})$ de (X_t, Y_t) y que además $(\hat{X}_{t_k}, \hat{Y}_{t_k}) \in \mathcal{D}$.
- 2) se consideran las variables temporales (Xp, Yp) para calcular la próxima posible posición de la trayectoria ejecutando el esquema de Euler de (5.14)-(5.15) para t_{k+1} como sigue:

$$Xp = \hat{X}_{t_k} + \left[u + \frac{\partial H}{\partial x} \frac{D}{H} + \frac{\partial D}{\partial x} \right] (\hat{X}_{t_k}, \hat{Y}_{t_k}) \Delta t + \sqrt{2D(\hat{X}_{t_k}, \hat{Y}_{t_k})} \varepsilon_{t_{k+1}}^1, \quad (5.19)$$

$$Yp = \hat{Y}_{t_k} + \left[v + \frac{\partial H}{\partial y} \frac{D}{H} + \frac{\partial D}{\partial y} \right] (\hat{X}_{t_k}, \hat{Y}_{t_k}) \Delta t + \sqrt{2D(\hat{X}_{t_k}, \hat{Y}_{t_k})} \varepsilon_{t_{k+1}}^2. \quad (5.20)$$

donde,

- para enteros $k \geq 0$, $t_k = k\Delta t$ y Δt denota el pasos de tiempo .
- Los factores $\varepsilon_{t_{k+1}}^j$, aproximan a los incrementos $W_{t_{k+1}}^j - W_{t_k}^j$, para $j = 1, 2$, del movimiento Browniano en (5.14)-(5.15). Por cada partícula se generan dos vectores independientes (uno para el cálculo de $(\hat{X}_{t_k})_k$ y otro para el de $(\hat{Y}_{t_k})_k$), cuyas entradas son números aleatorios independientes $\varepsilon_{t_k}^j$ con distribución normal de parámetros $(0, \Delta t)$.
- Las funciones u y v son aproximaciones de las velocidades en la superficie del cuerpo de agua, calculadas usando el algoritmo 5.1.1.1, y H and D son las aproximaciones de la profundidad y del coeficiente de difusión respectivamente. Las aproximaciones u , v , H and D sólo están disponibles sobre una malla

$$x_i = x_0 + i \times \Delta x \quad y \quad y_j = y_0 + j \times \Delta y \quad \text{para } i = 0, 1, \dots, n_x \quad y \quad j = 0, 1, \dots, n_y. \quad (5.21)$$

ajustada a las dimensiones exactas de la superficie \mathcal{D} del cuerpo de agua de interés.

Para calcular (Xp, Yp) con (5.19)-(5.20), es necesario evaluar u , v , H y D en $(\hat{X}_{t_k}, \hat{Y}_{t_k})$. Pero, de acuerdo con la definición del modelo, $(\hat{X}_{t_k}, \hat{Y}_{t_k})$ puede tomar cualquier posición del conjunto continuo en $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^2$, mientras que u , v , H y D sólo están definidos sobre una discretización de \mathcal{D} . Entonces, es necesario identificar la celda de la discretización en (5.21) donde se encuentra $(\hat{X}_{t_k}, \hat{Y}_{t_k})$ para realizar un procedimiento de interpolación que permita evaluar las funciones señaladas en $(\hat{X}_{t_k}, \hat{Y}_{t_k})$.

- 3) se verifica si la posición candidata (Xp, Yp) está o no en el dominio que modela la superficie del cuerpo de agua en estudio: Si $(Xp, Yp) \in \mathcal{D}$, se define

$$(\hat{X}_{t_{k+1}}, \hat{Y}_{t_{k+1}}) = (Xp, Yp),$$

y se sigue el cálculo del próximo punto de la discretización de la trayectoria de la partícula, pero;

- Si $(Xp, Yp) \in \mathcal{D}^c \cap V_{\partial\mathcal{D}}(r)$ con $V_{\partial\mathcal{D}}(r) = \{z \in \mathbb{R}^2 : d(z, \partial\mathcal{D}) \leq r\}$ para algún $r > 0$, definido en función de las características de $\partial\mathcal{D}$ y el tamaño y de la malla con respecto a la cual la discretización de la trayectoria de la partícula está siendo calculada, entonces

$$\hat{X}_{t_{k+1}} = Xp - 2F^\gamma(Xp, Yp)\gamma_1(Xp, Yp), \quad (5.22)$$

$$\hat{Y}_{t_{k+1}} = Yp - 2F^\gamma(Xp, Yp)\gamma_2(Xp, Yp), \quad (5.23)$$

donde $\Gamma = (\gamma_1(z), \gamma_2(z))$ denota el vector normal unitario hacia adentro para $\partial\mathcal{D}$ correspondiente a la proyección normal de z en $\partial\mathcal{D}$ para $z \in \mathcal{D}^c \cap V_{\partial\mathcal{D}}(r)$, y $F^\gamma(z)$ denota la distancia algebraica de z a $\partial\mathcal{D}$ paralelo a γ .

- Si $(Xp, Yp) \in \mathcal{D}^c \cap V_{\partial\mathcal{D}}^c(r)$ la simulación de (Xp, Yp) es reiniciada.

De acuerdo con [6], para dominios con fronteras acotadas y de clase \mathbf{C}^5 existe $r > 0$ tal que, para cualquier punto fuera del dominio la proyección normal del punto a la frontera es único. En la próxima sección se expone una implementación de este algoritmo usando datos del Lago de Valencia en Venezuela. La frontera de la superficie de este lago es acotada pero no es de clase \mathbf{C}^5 , por esta razón, existen puntos $z \in V_{\partial\mathcal{D}}(r)$ para los cuales, su proyección normal a $\partial\mathcal{D}$ no es única. Para $z \in V_{\partial\mathcal{D}}(r)$ con esta condición, se selecciona la reflexión normal correspondiente a la más pequeña de las distancias de z a $\partial\mathcal{D}$.

La figura 5.2 ilustra el procedimiento antes expuesto. En ella se observa las trayectorias de 7 partículas sobre la superficie de un cuerpo cerrado sobre el plano que corresponde a los datos del Lago de Valencia en Venezuela. Las partículas consideradas fueron movidas usando el algoritmo 5.1.2.1. Las trayectorias discretizadas fueron generadas con distribución inicial puntual en $(30,2,13,1)$, coeficiente de difusión $D = 5 \times 10^{-5}$ y velocidades superficiales del cuerpo de agua obtenidas a partir del modelo hidrodinámico expuesto en la subsección 5.1.1, implementado con información del Lago de Valencia. Las trayectorias mostradas corresponden a 10000 pasos de tiempo $\Delta t = 0,3573$.

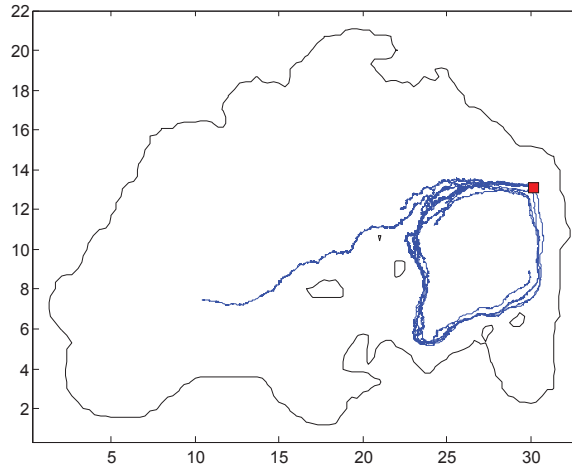


Figura 5.2: Modelo paseo aleatorio: trayectorias de 7 partículas con posición inicial $(30,2,13,1)$.

5.1.3. Modelo estocástico: vuelo aleatorio

De acuerdo con [25], en la realidad, para cortos períodos de tiempo luego de la inyección de una partícula en un fluido turbulento, su velocidad es muy cercana a una constante y para largos períodos de tiempo después, sus movimientos son cada vez menos correlacionados. El modelo paseo aleatorio (y en consecuencia la ecuación de advección- difusión), modela con precisión este comportamiento solamente para largos períodos de simulación, porque los desplazamientos aleatorios de las partículas en este modelo son simulados por los incrementos de un movimiento Browniano, que sabemos, son no correlacionados debido a su independencia. El modelo estocástico vuelo aleatorio corrige este defecto, al sustituir los términos de la difusión en las ecuaciones (5.14)-(5.15) por procesos de Ornstein Unlenbeck que describen con precisión el comportamiento real de las velocidades de las partículas en instantes de tiempo t menores a T_L donde T_L denota una escala de tiempo Lagrangiana. Esta escala de tiempo T_L que modela el momento a partir del cual los movimientos de las partículas son cada vez menos correlacionados, es interpretada como una medida del tiempo que tarda la partícula en perder la memoria de su velocidad inicial turbulenta (ver[5] y [25]). La ecuación que describe el modo paseo aleatorio es como sigue:

$$dX_t = \left[u + U_t + \left(D \frac{\partial H}{\partial x} \right) \frac{1}{H} + \frac{\partial D}{\partial x} \right] dt, \quad t \geq t_0, \quad (5.24)$$

$$dY_t = \left[v + V_t + \left(D \frac{\partial H}{\partial y} \right) \frac{1}{H} + \frac{\partial D}{\partial y} \right] dt, \quad t \geq t_0, \quad (5.25)$$

$$dU_t = -\left(\frac{1}{T_L} \right) U_t dt + (\hat{K})^{1/2} dB_t^1, \quad t \geq t_0, \quad (5.26)$$

$$dV_t = -\left(\frac{1}{T_L} \right) V_t dt + (\hat{K})^{1/2} dB_t^2, \quad t \geq t_0, \quad (5.27)$$

con $\hat{K} = 2D/T_L^2$, donde $2D$ es el coeficiente de difusión de las EDEs (5.14)-(5.15) correspondientes al modelo paseo aleatorio, $X_{t_0} = x_0$, $Y_{t_0} = y_0$ y U_{t_0} y V_{t_0} son variables aleatorias, ambas con distribución Gaussiana de media cero y varianza $\hat{K}T_L/2$. En el sistema anterior (X_t, Y_t) representa la posición de las partículas sobre la superficie del cuerpo de agua bajo estudio, y (U_t, V_t) representa las velocidades aleatorias de la partícula inducidas por la corriente turbulenta del fluido donde se encuentran las partículas.

Debido a que U_0 y V_0 tienen distribución normal con media cero y varianza $\hat{K}T_L/2$, entonces U_t y V_t son procesos Gaussianos de media cero y función de covarianza $\rho(s, t) = \frac{\hat{K}T_L}{2} e^{-|t-s|/T_L}$, (ver [31], página 358). Esto muestra que la función de autocorrelación de $(U_t)_{t \geq 0}$ y $(V_t)_{t \geq 0}$

$$R(\tau) = \frac{\mathbf{E}(U_{t+\tau}U_t)}{\hat{K}T_L/2} = \frac{\mathbf{E}(V_{t+\tau}V_t)}{\hat{K}T_L/2} = e^{-\tau/T_L}, \quad (5.28)$$

se aproxima a uno para $\tau \ll T_L$, y tiende a cero si $\tau \gg T_L$, para $\tau \geq 0$. Esto simula muy bien el comportamiento de las velocidades aleatorias de las partículas en el fluido.

Para los instantes de tiempos $(t - t_0)$ tales que $(t - t_0) \gg T_L$, este modelo es consistente con la ecuación de advección-difusión (5.11), ya que para $(t - t_0)/T_L \rightarrow \infty$ o $T_L \rightarrow 0$, las ecuaciones (5.24) - (5.27) se reducen a las ecuaciones diferenciales:

$$dX_t = \left[u + \left(D \frac{\partial H}{\partial x} \right) \frac{1}{H} + \frac{1}{2} \frac{\partial D}{\partial x} \right] dt + \sqrt{2D} dB_t^1, \quad (5.29)$$

$$dY_t = \left[v + \left(D \frac{\partial H}{\partial y} \right) \frac{1}{H} + \frac{1}{2} \frac{\partial D}{\partial y} \right] dt + \sqrt{2D} dB_t^2. \quad (5.30)$$

donde $t \geq t_0$, $X_{t_0} = x_0$ and $Y_{t_0} = y_0$ (ver [30], sección 3).

A continuación se presenta un esbozo del procedimiento que permite obtener el límite arriba mencionado. Se supone por simplicidad que D es una constante y que es posible trabajar con una sola coordenada. Bajo estas hipótesis el modelo vuelo aleatorio se reescribe como sigue:

$$\begin{aligned} dX_t &= \left[u + U_t + \frac{D}{H(X_t)} \frac{\partial H(X_t)}{\partial x} \right] dt \\ dU_t &= -\frac{1}{T_L} U_t dt + \frac{\sqrt{2D}}{T_L} dB_t. \end{aligned} \quad (5.31)$$

De esta forma se tiene que

$$\int_s^t U_u du = T_L U_s - T_L U_t + \sqrt{2D}(W_t - W_s).$$

Yielding in (5.31)

$$X_t^{T_L} - X_s^{T_L} = u(t-s) + T_L U_s - T_L U_t + \sqrt{2D}(W_t - W_s) + D \int_s^t \frac{1}{H(X_u^{T_L})} \frac{\partial H(X_u^{T_L})}{\partial x} du.$$

Supongamos que la función $\frac{1}{H} \frac{\partial H}{\partial x}$ es Lipschitz. Entonces haciendo uso de diferencias entre el proceso de arriba y la siguiente difusión

$$Y_t - Y_s = u(t-s) + \sqrt{2D}(W_t - W_s) + D \int_s^t \frac{1}{H(Y_u)} \frac{\partial H(Y_u)}{\partial x} du,$$

puede ser demostrado que para todo compacto $A \subset \mathbb{R}$ se consigue que $\sup_{t \in A} |X_t^{T_L} - Y_t| \rightarrow 0$ cuando $T_L \rightarrow 0$, ver [40] en las páginas 71 – 76 para un resultado similar.

Las ecuaciones (5.29) - (5.30) deben ser interpretadas, por definición, en el sentido de Stratonovich [2]. Las ecuaciones de Itô correspondientes a las ecuaciones anteriores son (5.14) - (5.15), que son las que definen el modelo paseo aleatorio. Como consecuencia, el modelo asintótico (5.29) - (5.30) es consistente con la ecuación de advección-difusión (5.11).

La difusión $\{(X_t, Y_t, U_t, V_t)\}_{t \geq t_0}$ es un proceso de Markov cuya densidad de transición de probabilidad satisface la ecuación hipoeĺptica de Fokker-Plank:

$$\begin{aligned} \frac{\partial p}{\partial t} = & -\frac{\partial}{\partial x} \left(\left[u + u_1 + \left(\frac{\partial H}{\partial x} D \right) \frac{1}{H} + \frac{\partial D}{\partial x} \right] p \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\left[v + v_1 + \left(\frac{\partial H}{\partial y} D \right) \frac{1}{H} + \frac{\partial D}{\partial y} \right] p \right) \\ & + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial u_1^2} (\hat{K} p) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial v_1^2} (\hat{K} p) + \frac{\partial}{\partial u_1} \left(\frac{p u_1}{T_L} \right) + \frac{\partial}{\partial v_1} \left(\frac{p v_1}{T_L} \right), \end{aligned} \quad (5.32)$$

para $(x, y, u_1, v_1) \in \mathbb{R}^4$, con condición inicial

$$p(x, y, u_1, v_1, t_0) = \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \frac{1}{\pi \hat{K} T_L} e^{-\frac{u_1^2 + v_1^2}{\hat{K} T_L}}. \quad (5.33)$$

Este resultado puede ser consultado en [30]. Existen modelos válidos bajo hipótesis más generales: una generalización del modelo vuelo aleatorio para sistemas con turbulencia (velocidad aleatoria), no estacionarios y no homogéneos pueden ser revisados en la subsección 4.2 of [5] y la función del proceso de velocidades en (5.28) puede ser modelado con mayor precisión incorporando ecuaciones para la aceleración y derivadas de ordenes superiores de la posición de las partículas (see [5]).

Análogo al caso del modelo paseo aleatorio, la condición de frontera de Neumann para el modelo de vuelo aleatorio es incorporada como un término de reflexión de la posición de la partícula, en sus ecuaciones de movimiento (5.24) and (5.25).

Aproximación numérica: modelo vuelo aleatorio.

El procedimiento para generar la aproximación numérica correspondiente al modelo vuelo aleatorio es similar al procedimiento correspondiente al modelo paseo aleatorio.

Algoritmo 5.1.3.1 *El algoritmo que aproxima la solución $(X_t, Y_t)_t$ del modelo vuelo aleatorio definido por (5.24)-(5.27), es el algoritmo 5.1.2.1 luego de reemplazar las ecuaciones (5.19) y (5.20) por las ecuaciones del esquema de Euler correspondiente (5.24)-(5.27) que siguen:*

$$\hat{X}_{t_{k+1}} = \hat{X}_{t_k} + \left[u + \frac{\partial H}{\partial x} \frac{D}{H} + \frac{\partial D}{\partial x} \right] (\hat{X}_{t_k}, \hat{Y}_{t_k}) \Delta t + \hat{U}_{t_k} \Delta t, \quad (5.34)$$

$$\hat{Y}_{t_{k+1}} = \hat{Y}_{t_k} + \left[v + \frac{\partial H}{\partial y} \frac{D}{H} + \frac{\partial D}{\partial y} \right] (\hat{X}_{t_k}, \hat{Y}_{t_k}) \Delta t + \hat{V}_{t_k} \Delta t, \quad (5.35)$$

donde, debido a que las soluciones analíticas de (5.26) y (5.27) son

$$U_t = U_0 e^{-\frac{1}{T_L} t} + \hat{K}^{1/2} \int_0^t e^{-\frac{1}{T_L} (t-s)} dB_s^1, \quad (5.36)$$

$$V_t = V_0 e^{-\frac{1}{T_L} t} + \hat{K}^{1/2} \int_0^t e^{-\frac{1}{T_L} (t-s)} dB_s^2, \quad (5.37)$$

las estimaciones de \hat{U}_{t_k} y \hat{V}_{t_k} de U_{t_k} y V_{t_k} , respectivamente, se obtienen usando el método de integración de Monte Carlo, y estimando U_{t_0} and V_{t_0} con números aleatorios de distribución normal de parámetros $(0, \hat{K} T_L)$.

5.2. Simulación de la dispersión de desechos orgánicos en el Lago de Valencia (Venezuela).

En esta sección se expone el comportamiento empírico de los modelos estocásticos que fueron desarrollados en las secciones 5.1.2 y 5.1.3. Con el objetivo de presentar los resultados de la implementación esta sección se divide en tres partes. Primero se presenta un análisis de los modelos paseo aleatorio y vuelo aleatorio, segundo se da una descripción de los datos usados en la implementación de estos modelos, y tercero, se presenta una comparación entre los resultados conseguidos al implementar sus esquemas numéricos usando datos del Lago de Valencia en Venezuela. En esta última parte, la implementación de los esquemas se hace considerando dos tipos de distribución inicial: distribución inicial concentrada en un punto fijo y distribución inicial generada a partir de imágenes satelitales.

5.2.1. Análisis de los modelos

De acuerdo con lo desarrollado en las secciones 5.1.2 y 5.1.3, el modelo paseo aleatorio simula con precisión la dispersión de partículas en un cuerpo de agua, siempre que haya transcurrido un período de tiempo "suficientemente largo" luego de haber iniciado la observación del comportamiento de las partículas en el fluido. Esto ocurre porque, en este modelo, el desplazamiento de las partículas impulsado por el coeficiente de difusión es simulado usando incrementos del movimiento Browniano, que sabemos son independientes. El modelo vuelo aleatorio propone la corrección de este defecto, reemplazando los términos de difusión de (5.14) y (5.15) por procesos de Ornstein Unlenbeck, que modelan el comportamiento de las velocidades aleatorias de las partículas para tiempos t menores a T_L , donde T_L representa una medida del tiempo que toma la partícula en "perder la memoria" de su velocidad inicial turbulenta (aleatoria). Adicional a esto, durante el desarrollo del modelo vuelo aleatorio se demuestra que, si $\frac{t-t_0}{T_L} \rightarrow \infty$ o $T_L \rightarrow 0$, los modelos estocásticos verifican una forma de consistencia. Por lo anterior, una comparación entre ambos modelos para instantes de tiempo antes y después de T_L , con T_L caracterizado por: $\frac{t-t_0}{T_L} \rightarrow \infty$ o $T_L \rightarrow 0$, resulta de gran interés. En las implementaciones fueron generados resultados orientados a confirmar empíricamente estas afirmaciones.

5.2.2. Datos usados en la implementación

En las implementaciones se utilizaron las velocidades horizontales del Lago de Valencia, obtenidas considerando velocidad y dirección del viento igual a 3 m/s sur-sur-oeste. Estas velocidades son datos obtenidos de [49]. Para el cálculo de estas velocidades se usó el modelo hidrodinámico expuesto en la subsección 5.1.1

Para hacer las simulaciones fue considerado $D = 5 \times 10^{-5} km^2/h$ como coeficiente de difusión para el Lago de Valencia. Este valor tiene el mismo orden de magnitud de $4 \times 10^{-2} m^2/s$ que es un valor experimental encontrado para el coeficiente de dispersión del lago Huron (ver [25], capítulo 6), en efecto $D = 5 \times 10^{-5} km^2/h = 1,39 \times 10^{-2} m^2/s$. Este dato es usado porque no existen datos experimentales de este tipo sobre el Lago de Valencia y no fue encontrado ninguna información sobre el valor del coeficiente de difusión para lagos con características similares al Lago de Valencia. Las referencias consultadas únicamente proveen valores experimentales de este coeficiente para océanos, ríos y lagos grandes (como el lago Huron en USA), y embalses. Antes de elegir el valor del coeficiente de difusión con el que se realizarían las implementaciones se hicieron muchas pruebas, pero seleccionamos $D = 5 \times 10^{-5} km^2/h$ porque observamos que con este valor se obtenía un mejor ajuste del comportamiento dispersivo esperado de las partículas, en función de la velocidad superficial y los vórtices del en el Lago de Valencia (ver figura 5.1).

A lo largo de las simulaciones fue considerado el paso de tiempo $\Delta t = 0,3573s$.

Para implementar los métodos numéricos de los modelos estocásticos usando la distribución generada a partir de imágenes satelitales, se descargaron imágenes satelitales del Lago de Valencia captadas por el sensor Thematic Mapper Mejorado (ETM) del satélite *Landsat 8*. Las imágenes fueron adquiridas de forma gratuita a través de la página del U.S. Geological Survey - EarthExplorer.

5.2.3. Implementación de los modelos

A continuación se presentan los resultados de las implementaciones de los modelos estocásticos usando datos del Lago de Valencia.

Ejemplo 1: Distribución inicial concentrada en un punto fijo.

Para presentar los resultados de las implementaciones correspondientes a la distribución inicial puntual, se muestran gráficas del comportamiento de las partículas antes y después de un valor seleccionado para el tiempo lagrangiano T_L .

Las figuras 5.3 y 5.4 muestran los resultados obtenidos al simular el desplazamiento de 2500 partículas desde su posición inicial común en el punto (30,2,13,1) hasta su posición final individual luego de 20000 pasos de tiempo $\Delta t = 0,3573$ s., usando los algoritmos 5.1.2.1 y 5.1.3.1. La implementación del modelo vuelo aleatorio se hizo con $T_L = 500$ s, que es aproximadamente $\frac{t_f}{14}$ donde $t_f = 7146$ s representa el tiempo total de propagación de las partículas sobre el lago. Las figuras 5.3(a) y 5.3(b) muestran la posición de las partículas en el instante de tiempo $t = 357,3$ s que es menor a $T_L = 500$ s. Al observar las dos figuras descritas se identifica un comportamiento menos dispersivo del vuelo aleatorio con respecto al paseo aleatorio. Sin embargo, en las figuras 5.4(a) y 5.4(b), se observa que para $t = 2858,4$ s, que es un valor más grande que $T_L = 500$ s, el comportamiento de ambos modelos es similar, lo cual confirma el comportamiento límite descrito teóricamente. Bajo las mismas condiciones que antes, pero con $T_L = 20$ s, las 5.6(a) y 5.6(b) muestran que, para el mismo valor de t , la semejanza entre ambos modelos llega a ser mucho más evidente. Esto se debe a que la autocorrelación de la velocidad "turbulenta" de las partículas, en la ecuación del modelo de vuelo aleatorio (5.28) tiende más rápido a cero cuando $T_L = 20$ s que cuando $T_L = 500$ s, y esto garantiza una convergencia más rápida de modelo vuelo aleatorio a paseo aleatorio (ver la sección 5.1.3).

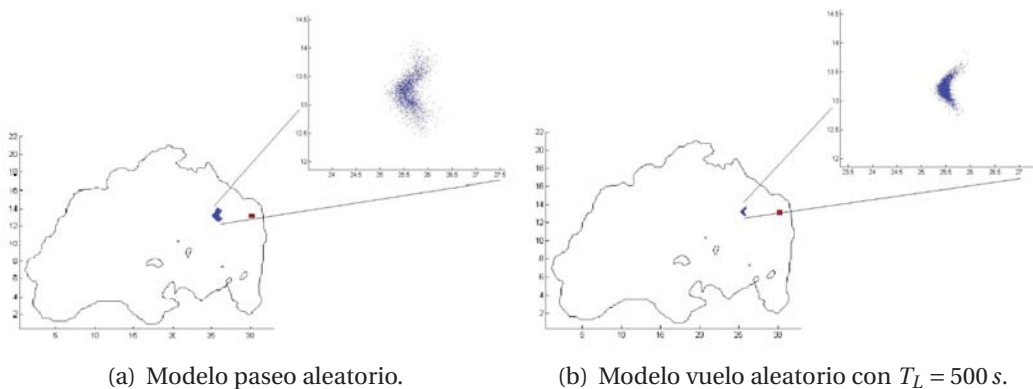


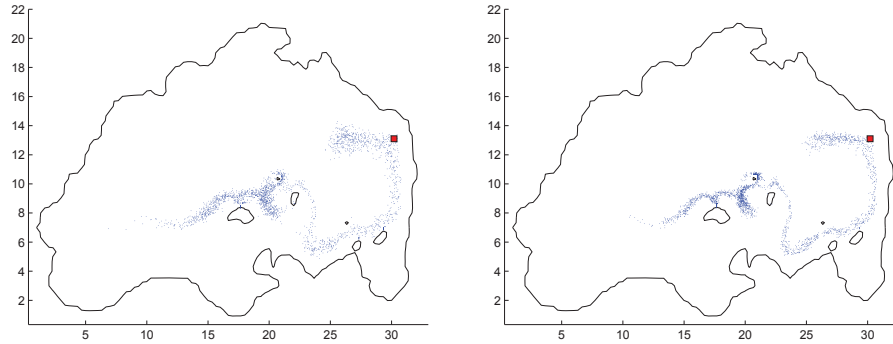
Figura 5.3: Posición de las partículas en $t = 357,3$ s, luego de iniciar su movimiento en el punto (30,2,13,1) (cuadrado en figura).

Las figuras 5.5 y 5.7 muestran las aproximaciones de la distribución de las partículas en instantes específicos de tiempo, usando estimadores de densidad por núcleo (Gausiano en este caso). Las figuras muestran la estimación de la distribución conjunta de las partículas en el lago, para los tiempos t considerados antes, cuando $T_L = 500$ s y $T_L = 20$ s. En estas figuras también se observa que el modelo vuelo aleatorio se aproxima más rápido al modelo paseo aleatorio cuando el primero es ejecutado con $T_L = 20$ s.

Example 2: Distribución inicial generada a partir de una imagen satelital

Este ejemplo tiene como objetivo describir la estimación, generada por los modelos estocásticos, de la dispersión real de la clorofila en el Lago de Valencia, durante 3215,3 segundos, contados a partir del 27-04-2014 a las 17:15:24 horas ($t_0 = 2014-04-27 T 17:15:24$)

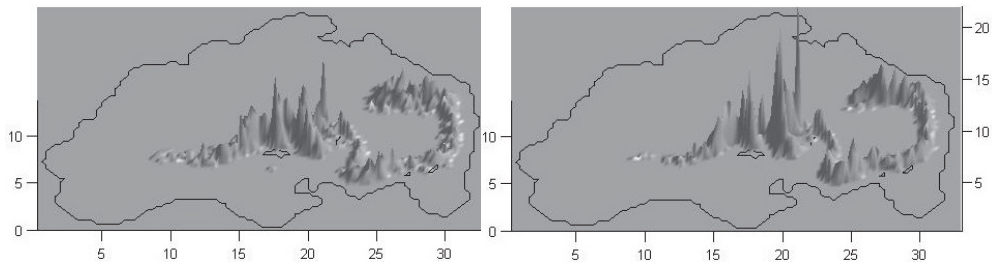
Para realizar la primera parte de la estimación, que corresponde a la generación de una muestra aleatoria de la distribución de la clorofila en el Lago de Valencia (en el instante de tiempo t_0), se sigue el procedimiento general



(a) Modelo paseo aleatorio.

(b) Modelo vuelo aleatorio con $T_L = 500$ s.

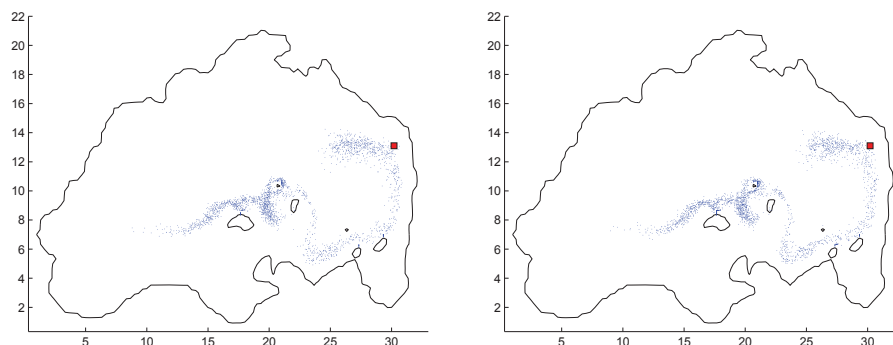
Figura 5.4: Posición de las partículas en $t = 2858,4$ s, luego de iniciar su movimiento en $(30,2,13,1)$.



(a) Densidad por núcleo para paseo aleatorio.

(b) Densidad por núcleo para vuelo aleatorio con $T_L = 500$ s.

Figura 5.5: Estimación de la densidad por núcleo de la distribución de partículas la figura 5.4.



(a) Modelo paseo aleatorio.

(b) Modelo vuelo aleatorio: $T_L = 20$ s.

Figura 5.6: Posición de las partículas en $t = 2858,4$ s, luego de iniciar su movimiento en $(30,2,13,1)$.

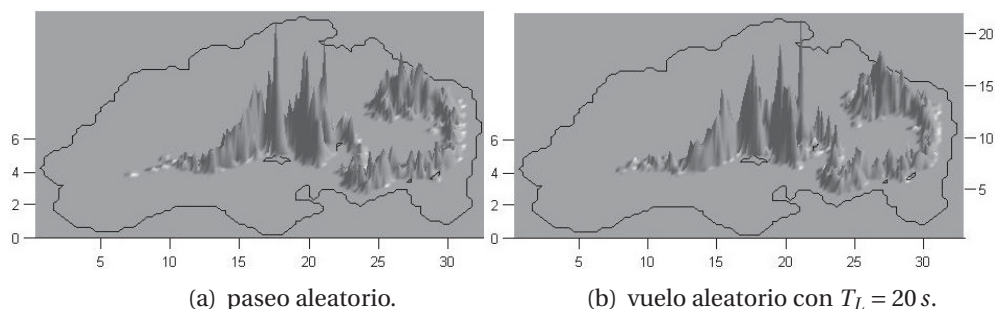


Figura 5.7: Estimación de la densidad por núcleo de la distribución de partículas la figura 5.6.

desarrollado en la subsección 4.2.2, y para el resto de la estimación del desplazamiento de la clorofila, se siguen los pasos de los algoritmos 5.1.2.1 y 5.1.3.1 descritos en la subsección 5.1. Un resumen del procedimiento completo se expone a continuación.

Como primer paso, se descargan las imágenes satelitales de la superficie del Lago de Valencia correspondientes al instante de tiempo t_0 , y se usa la información de las bandas 4 y 5 para calcular el índice de vegetación $NDVI$, del lago.

Segundo, con este índice de vegetación $NDVI$ se identifican las áreas con presencia de clorofila en el lago (ver la figura 4.3), y se definen sobre ellos, una densidad de probabilidad π que aproxima la densidad de la clorofila y, como consecuencia, define una distribución de probabilidad que simula la distribución de la clorofila en t_0 .

Tercero, por cada mancha convexa de clorofila mostrada en la figura 4.3, se selecciona un punto a partir del cual la aproximación de las trayectorias del proceso de Langevin definido por la ecuación (4.16), en función de la densidad π , es generado; entonces, una colección de 15000 puntos de esta trayectoria son seleccionados, espaciados por 100 pasos de tiempo Δt , para garantizar que la muestra final sea aproximadamente independiente.

Finalmente, las coordenadas de cada elemento de la muestra aleatoria que se acaba de construir, son transformados a sus coordenadas correspondientes en la malla donde fueron calculadas las velocidades de la corriente del Lago de Valencia. Estas nuevas coordenadas, mostradas en la figura 5.8, son usadas como condición inicial en los algoritmos 5.1.2.1 y 5.1.3.1 de paseo aleatorio y vuelo aleatorio respectivamente. Luego de 9000 pasos de tiempo Δt , la simulación de la dispersión de la clorofila en el lago durante un intervalo de tiempo igual a $t = 3215,3$ segundos es obtenida. Las gráficas correspondientes a este resultado son mostradas en la figuras 5.9(a) y 5.9(b), y las figuras 5.10(a) y 5.10(a) muestran las estimaciones de las densidades correspondientes, usando estimadores por núcleo Gaussianos.

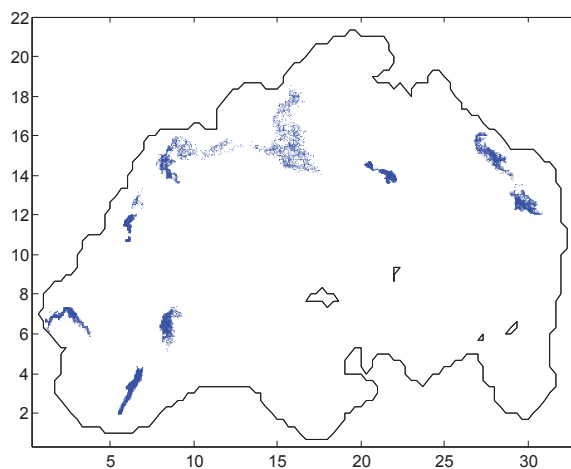


Figura 5.8: Pares aleatorios con la distribución de la clorofila t_0 , sobre la malla del modelo hidrodinámico.

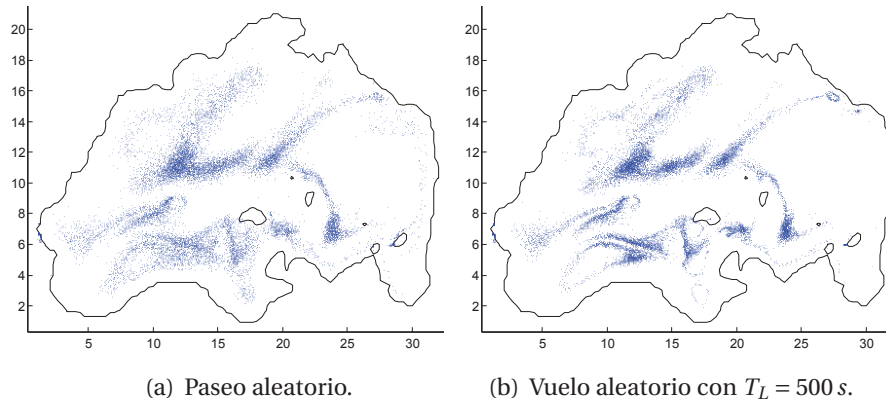


Figura 5.9: Disposición de las partículas de clorofila en el Lago de Valencia, pasados $t = 3215,3 s$ luego de haber iniciado la observación del desplazamiento de estas partículas en $t_0 = 2014 - 04 - 27 T 17 : 15 : 24 .$

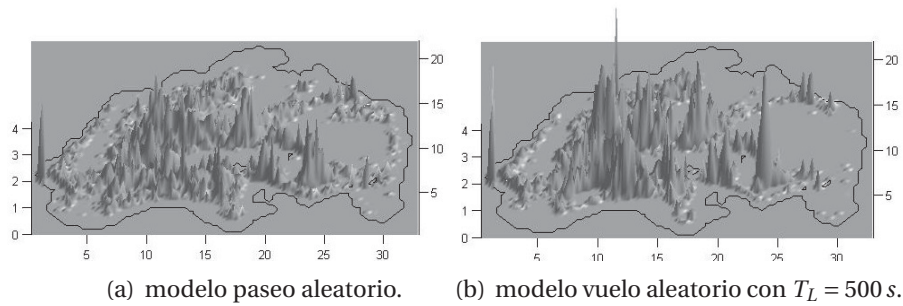


Figura 5.10: Estimación de la densidad por núcleo de la distribución de partículas la figura 5.9.

Conclusiones

En este trabajo se llevo a cabo el estudio de dos problemas de estimación: 1) ajuste de modelos matemáticos a datos de series temporales correspondientes a dinámicas moleculares y descargas neuronales, y 2) generación de un método de aproximación completo para la simulación del transporte de desechos orgánicos en cuerpos de agua cerrados y poco profundos.

Con el objetivo de darle respuesta al primer problema, se definieron estimadores no paramétricos del tipo Nadaraya-Watson para la densidad de la solución y los coeficientes de un tipo de sistema hipoeĺptico de *EDEs*, que ha sido ampliamente usado para modelar dinámicas moleculares y descargas neuronales, pero para el cual, antes de la publicación de [9], no se registraban publicaciones que abordaran el estudio de estimaciones no paramétrica para la densidad y los coeficientes correspondientes al sistema. El tipo de sistema hipoeĺptico considerado es caracterizado por una relación de generación y disipación de energía entre su drift y su coeficiente de difusión. Esta relación entre el drift y el coeficiente de difusión, conocida como condición de fluctuación-disipación, implica la simplificación de hipótesis que permiten concluir que el proceso solución del sistema, conocido como proceso estocásticos Hamiltoniano amortiguados, es ergódico y esto, junto con hipótesis adicionales, permite demostrar resultados del tipo ergódico para cada uno de los estimadores propuestos.

Para analizar la bondad de los estimadores propuestos se realizaron varios experimentos numéricos. Sólo se exponen los resultados correspondientes a cuatro sistemas hipoeĺpticos con la condición de fluctuación disipación. Para cada uno de esto 4 sistemas se aproximó una de sus realizaciones para evaluar los estimadores propuestos y comparar los resultados con los coeficientes teóricos que definen los sistemas hipoeĺpticos considerados. Adicionalmente se realizaron pruebas correspondientes al error de estimación: cálculo del error cuadrático medio integrado relativo de cada estimador, y tasa de convergencia del método que define al algoritmo considerado, para estimar las muestras de las trayectorias solución (realizaciones) del sistema en estudio. Los resultados de estos experimentos numéricos permiten concluir que los estimadores propuestos son muy sensibles a la selección de los parámetros de discretización, que definen al tipo de estimador por núcleo considerado para la densidad correspondiente al sistema hipoeĺptico de interés, y que en consecuencia se hace necesario el análisis de modelos orientados a la estimación eficiente de estos parámetros, como por ejemplo: métodos de validación cruzada (cross validation), o los métodos identificados como plug-in methods.

Con respecto al segundo problema de estimación, luego de estudiar las ecuaciones de Saint-Venant, que representan un modelo teóricamente apropiado para determinar la corriente del fluido correspondiente al cuerpo de agua cerrado y poco profundo, y estudiar los modelos estocásticos paseo aleatorio y vuelo aleatorio, se llevó a cabo la implementación de cada uno de estos modelos estocásticos con el objetivo de presentar su estimación, para la dispersión real de un contaminante en el Lago de Valencia, durante un período de tiempo específico.

De acuerdo con las características de los modelos estocásticos, para llevar a cabo la implementación antes señalada, fue necesario determinar la distribución de contaminantes en el lago correspondiente al inicio de observación del desplazamiento del contaminante.

Para construir una densidad para esta distribución inicial, se asumió la presencia de clorofila en el lago como indicador de la presencia del contaminante, basados en el hecho de que los componentes fundamentales de los desechos orgánicos (fósforo y nitrógeno) descargados en cuerpos de agua son los principales nutrientes de los elementos que contienen clorofila (como las algas y las plantas vasculares). La presencia de clorofila en el lago se consiguió a través del índice de vegetación del lago de Valencia, el cual fue calculado a partir de imágenes satelitales del mismo.

El procedimiento considerado para generar la difusión que modeló la condición inicial de los sistemas estocásticos, a partir de la densidad dato construída en función del índice de vegetación en el lago, asegura que la

condición inicial corresponde a pares aleatorios de una densidad de probabilidad que aproxima con precisión la densidad real de los desechos orgánicos en el lago, y esto garantiza que la simulación del transporte del contaminante no esté determinado únicamente por la posición inicial de sus partículas, sino también por la densidad de la contaminación en el área determinada por estas posiciones. Este procedimiento de generación de pares aleatorios para modelar la condición inicial de nuestra implementación, fue ejecutado usando un algoritmo de rebote simétrico en el borde, desarrollado por M. Bossy et al en [6]. Este algoritmo garantiza el rebote simétrico, al interior del lago, de las partículas del contaminante que mediante el algoritmo de simulación arriban a la parte exterior del borde lago, pero lo suficientemente cerca del agua, para justificar la permanencia de la partícula en el lago a través del rebote. Dada la compleja geometría de la frontera del Lago de Valencia, nosotros codificamos una ligera modificación del algoritmo teórico propuesto por M. Bossy et al. en [6].

Para finalizar, mencionamos los 4 principales logros de este trabajo de tesis doctoral:

Primero, se definieron estimadores no paramétricos de la densidad y los coeficientes de sistemas hipoelípticos de *EDEs* caracterizados por la condición de fluctuación-disipación. Para cada uno de estos estimadores se demostraron teoremas de tipo ergódico, que garantizan la convergencia teórica del estimador al objeto aproximado, y se evaluó la bondad de esta estimación a través de numerosos experimentos aleatorios que permitieron concluir, que los estimadores propuestos son muy sensibles a la selección de los parámetros de discretización que definen al tipo de estimador por núcleo, considerado para la densidad del sistema hipelíptico de interés.

Segundo, la simulación de una difusión estacionaria, distribuida por una densidad dato fabricada a partir de imágenes satelitales correspondientes a una región acotada del Lago de Valencia, determinada por la presencia de clorofila.

Tercero, el estudio y posterior implementación de los modelos estocásticos paseo aleatorio y vuelo aleatorio, usando datos del lago de Valencia. Los resultados de esta comparación evidenciaron, en la práctica, las similitudes y diferencias entre los modelos señaladas durante el desarrollo teórico.

Finalmente, aunque la implementación correspondiente al segundo problema de estimación es realizada usando datos correspondientes al Lago de Valencia, la descripción teórica y práctica (los algoritmos de simulación correspondientes a cada uno de los modelos que intervienen en el estudio), es general y puede ser aplicado a otro cuerpo de agua cerrado, con los ajustes correspondientes a las características que lo gobiernan.

Índice de Figuras

3.1. A la izquierda: aproximación de una trayectoria de X . A la derecha: aproximación de la trayectoria correspondiente de Y	55
3.2. Discretización de la densidad invariante a la izquierda y su estimación a la derecha	56
3.3. A la izquierda: comparación entre la marginal con respecto a X de la densidad invariante (trazo continuo) y su estimación (trazo discontinuo). A la derecha: comparación similar respecto a Y	56
3.4. Discretización de la diferencia $ p_s^\beta - \tilde{p}_s^\beta $	57
3.5. Discretización del drift (línea continua) versus su estimación (línea discontinua) para $y_0 = 0,024$ a la izquierda y para $x_0 = 0,02$ a la derecha	57
3.6. Discretización del drift a la izquierda y su estimación a la derecha, ambas calculadas sobre $[-0,85, 0,85] \times [-1,7, 1,7]$ que es una restricción del dominio original D_m	58
3.7. Valor absoluto de la diferencia entre el drift y su estimación calculadas sobre una discretización de $[-0,85, 0,85] \times [-1,7, 1,7]$ que es una restricción del dominio original D_m	58
3.8. Discretización de $\nabla_x p_s(x, y)$ (izquierda), y su estimación (derecha).	59
3.9. Valor absoluto de la diferencia entre $\nabla_x p_s$ y su estimación	59
3.10. Discretización de $-2V'$ (línea continua) y su estimación (línea discontinua) para $y = -0,26$	59
3.11. Discretización de la función $\sigma^2 y_0$, for $y_0 = 1$ (curva de trazo continuo) versus su estimación (curva de trazo discontinuo), y para $y = 0,085$ a la derecha. La línea continua corresponde al valor de $4y$	60
3.12. A la izquierda: RC correspondiente a una trayectoria aproximada con $h_n = 0,1$ y $n = 10^4$ ($\gamma = 0,25$). A la derecha: RC de a una trayectoria aproximada con $h_n = 0,01$ y $n = 10^5$ ($\gamma = 0,4$).	60
3.13. A la izquierda: RC correspondiente a una trayectoria aproximada con $h_n = 0,003$ y $n = 284800$ ($\gamma = 0,45$). A la derecha: RC de una trayectoria aproximada con $h_n = 0,0013$ y $n = 762700$ ($\gamma = 0,49$).	61
3.14. Densidad invariante (a la izquierda) y su estimación (a la derecha).	62
3.15. A la izquierda: comparación entre la marginal con respecto a X de la densidad invariante (trazo continuo) y su estimación (trazo discontinuo). A la derecha: comparación similar respecto a Y	62
3.16. Valor absoluto de la diferencia entre la densidad invariante y su estimación.	62
3.17. Drift (línea continua) versus su estimación (línea discontinua) para $y_0 = 0,005451$ a la izquierda, y para $x_0 = 0,33538$ a la derecha.	63
3.18. Gráfico del drift a la izquierda y de su estimación a la derecha sobre el la restricción $[-1, 1] \times [-1,7, 1,7]$ del dominio original D_m	63
3.19. Discretización de $\nabla_x p_s(x, y)$ (izquierda), y su estimación (derecha).	63
3.20. A la izquierda: Valor absoluto de la diferencia entre $\nabla_x p_s$ y su estimación. A la derecha: Discretización de $-2V'(x)$ (línea continua) y su estimación (línea discontinua) para el valor fijo $y = 0,62177$	64
3.21. Discretización de la función $\sigma^2 y_0$, for $y_0 = 1$ (curva continua) versus su estimación (curva discontinua), y para $y = -0,028$ a la derecha. La línea continua corresponde al valor de $4y$	64
3.22. A la izquierda: RC de una trayectoria aproximada con $h_n = 0,1$ y $n = 10^4$ ($\gamma = 0,25$). A la derecha: RC de una trayectoria aproximada con $h_n = 0,01$ y $n = 10^5$ ($\gamma = 0,4$). Para ambas trayectorias el tiempo de recorrido es $T = 1000$	64
3.23. A la izquierda: RC correspondiente a una trayectoria aproximada con $h_n = 0,003$ y $n = 284800$ ($\gamma = 0,45$). A la derecha: RC correspondiente a una trayectoria aproximada con $h_n = 0,0013$ y $n = 762700$ ($\gamma = 0,49$). Para ambas trayectorias aproximadas el tiempo de recorrido es $T = 1000$	65
3.24. Aproximación de una trayectoria de X , a la izquierda, y de Y a la derecha.	66

3.25. Discretización de la densidad invariante a la izquierda y su estimación a la derecha	66
3.26. A la izquierda: densidad marginal con respecto a X de la densidad invariante (trazo continuo) versus su estimación (trazo discontinuo). A la derecha: se presenta una comparación similar entre la marginal con respecto a Y de la densidad invariante y su estimación.	66
3.27. Aproximación de una trayectoria de X módulo 2π	67
3.28. Discretización de la densidad invariante a la izquierda y su estimación a la derecha	67
3.29. Discretización del drift (a la izquierda) y su estimación (a la derecha)	68
3.30. Valor absoluto de la diferencia entre el drift y su estimación calculadas sobre una discretización de $[-0,85, 0,85] \times [-1,7, 1,7]$ que es una restricción del dominio original D_m	68
3.31. Discretización de $\nabla_x p_s(x, y)$ (izquierda), y su estimación (derecha).	68
3.32. Discretización de $-2V'$ (línea continua) y su estimación (línea discontinua) para $y = 0,043$	69
3.33. Discretización de la función $\sigma^2 y_0$, for $y_0 = 1$ (curva continua) versus su estimación (curva discontinua), y para $y = -0,0064$ a la derecha. La línea continua corresponde al valor de $4y$	69
3.34. A la izquierda: RC correspondiente a una trayectoria aproximada con $h_n = 0,1$ y $n = 10^4$ ($\gamma = 0,25$). A la derecha: RC correspondiente a una trayectoria aproximada con $h_n = 0,01$ y $n = 10^5$ ($\gamma = 0,4$). Para ambas trayectorias aproximadas el tiempo de recorrido es $T = 1000$	69
3.35. A la izquierda: RC correspondiente a una trayectoria aproximada con $h_n = 0,003$ y $n = 284800$ ($\gamma = 0,45$). A la derecha: RC correspondiente a una trayectoria aproximada con $h_n = 0,0013$ y $n = 762700$ ($\gamma = 0,49$). Para ambas trayectorias aproximadas el tiempo de recorrido es $T = 1000$	70
4.1. A la izquierda está $B6$ capturada en t_0 y a la derecha aparece recortada.	78
4.2. A la izquierda máscara creada a partir de $B6$ y a la derecha gráfica del $NDVI$ en t_0	78
4.3. Conjuntos convexos determinados por la presencia de clorofila en el Lago de Valencia.	78
4.4. Pares aleatorios con distribución $d\mu(x) = \varphi^2(x)dx$	79
5.1. Magnitud de la velocidad de la corriente sobre la superficie del Lago de Valencia	83
5.2. Modelo paseo aleatorio: trayectorias de 7 partículas con posición inicial $(30,2, 13,1)$	86
5.3. Posición de las partículas en $t = 357,3$ s, luego de iniciar su movimiento en el punto $(30,2, 13,1)$ (cuadrado en figura).	90
5.4. Posición de las partículas en $t = 2858,4$ s, luego de iniciar su movimiento en $(30,2, 13,1)$	91
5.5. Estimación de la densidad por núcleo de la distribución de partículas la figura 5.4.	91
5.6. Posición de las partículas en $t = 2858,4$ s, luego de iniciar su movimiento en $(30,2, 13,1)$	91
5.7. Estimación de la densidad por núcleo de la distribución de partículas la figura 5.6.	92
5.8. Pares aleatorios con la distribución de la clorofila t_0 , sobre la malla del modelo hidrodinámico.	92
5.9. Disposición de las partículas de clorofila en el Lago de Valencia, pasados $t = 3215,3$ s luego de haber iniciado la observación del desplazamiento de estas partículas en $t_0 = 2014 - 04 - 27 T 17 : 15 : 24$	93
5.10. Estimación de la densidad por núcleo de la distribución de partículas la figura 5.9.	93

Bibliografía

- [1] M. P. Arcos, S. L. Ávila, S. M. Estipiñan, A.C. Gómez (2005). *Indicadores microbiológicos de contaminación de las fuentes de agua*, Nova-Publicación Científica, Vol. 3, pp. 69-79.
- [2] L. Arnold (1974). *Stochastic differential equations: Theory and applications*, Wiley, London.
- [3] M. Awad (2014) *Sea water chlorophyll-a estimation using hyperspectral images and supervised artificial neural network*, Elsevier Ecol. Inf, Vol. 24, pp. 60-68.
- [4] D. Bakry, P. Cattiaux, A. Guillin (2008). *Rate of convergence for ergodic continuous Markov processes: Lyapunov versus Poincaré*, J. of Func. Analysis. Vol. 254, pp. 727-759.
- [5] S. Bauer and M. Swenson and A. Griffa and A. Mariano and K. Owens (1998). *Eddy-mean flow decomposition and eddy-diffusivity estimates in the tropical Pacific Ocean*, Journal of Geophysical Research, Vol. 103, pp. 855-871.
- [6] M. Bossy, E. Gobet, D. Talay (2004). *A symmetrized Euler scheme for an efficient approximation of reflected diffusions*, J. Appl. Prob, Vol. 41, pp. 877-889.
- [7] R. Carmona (1979). *Processus de diffusion gouvernée par la forme de Dirichlet de l'Opérateur de Schrödiinger*, Séminaire de Probabilités (Strasbourg), tome 13, pp. 557-569.
- [8] R. Carmona (1979). *Regularity Properties of Schrödiinger and Dirichlet Semigroups*, Journal of Functional Analysis, Vol. 33, pp. 259-296.
- [9] P. Cattiaux, J. R. León, A. Pineda and C. Prieur (2016). *An overlook on statistical inference issues for stochastic damping hamiltonian systems under the fluctuation-dissipation condition*, Statistics, Vol. 51, No. 1, pp. 11-29.
- [10] P. Cattiaux, J. R. León and C. Prieur (2014). *Estimation for Stochastic Damping Hamiltonian Systems under Partial Observation. I. Invariant density*. Stochastic Processes and their Applications, Vol. 124, No. 3, pp. 1236-1260.
- [11] P. Cattiaux, J. R. León and C. Prieur (2014). *Estimation for Stochastic Damping Hamiltonian Systems under Partial Observation. II. Drift term*, ALEA, Vol. 11, No. 1, pp. 359-408.
- [12] P. Cattiaux, J. R. León and C. Prieur (2015). *Recursive Estimation for Stochastic Damping Hamiltonian Systems*, aceptada en Journal of Nonparametric Statistics
- [13] P. Cattiaux, J. R. León and C. Prieur (2015). *Estimation for Stochastic Damping Hamiltonian Systems under Partial Observation. III. Diffusion term*, aceptada en Annals of Applied Probability.
- [14] P. Cattiaux, J. R. León and C. Prieur (2017). *Invariant density estimation for a reflected diffusion using an Euler scheme*, aceptada en Monte Carlo Methods and Applications.
- [15] A. Chorin, J. Marsden (2000). *A Mathematical Introduction to Fluid Properties Mechanics*, Library of Congress Cataloging in Publication data.

- [16] Y. A. Davydov (1973). *Mixing conditions for Markov chains*. Theory Probab. Appl. 18, 313- 328.
- [17] A. F. De Baas, H. Van Dop, F. T. M. Nieuwstadt (1980). *An application of the Langevin equation for inhomogeneous conditions to dispersion in a convective boundary layer*, Quart Journ. Roy. Met. Soc. Vol. 12, pp. 165-180.
- [18] B. De Jong (1979). *Stochastic simulation of diffusion phenomena with an application to dispersion by turbulent fluid flow*, Report DIV 1979913.
- [19] G. De La Lanza, S. Hernández, J. L. Carbajal (2000). *Organismos indicadores de la calidad de agua y de la contaminación (Bioindicadores)*, Universidad Nacional Autónoma de México, México.
- [20] P. Doukhan (1994). *Mixing. Properties and examples*, Lecture Notes in Statistics, 85, Springer-Verlag, New York.
- [21] D. Down, S. P. Meyn and R. Tweedie (1995). *Exponential and uniform ergodicity of Markov processe*, Ann. Probab, Vol. 23, No. 4, pp. 1671-1691.
- [22] D. Fan, Y. Huang, L. Song, D. Liu, G. Zhang, B. Zhang (2014) *Prediction of chlorophyll-a concentration using HJ-1 satellite imagery for Xiangxi Bay in Three Gorges Reservoir*, Water Science and Engineering, Vol. 7, No. 1, pp. 70-80.
- [23] T. Fattler, M. Grothaus (2007). *Strong Feller properties for distorted Brownian motion with reflecting boundary condition an application to continuous N-particle systems with singular interactions*, Journal of Functional Analysis, Vol. 246, pp. 217-241.
- [24] W. Fei, W. Xuan, Z. Ying, Y. Zhifeng (2012). *Long-term changes of water level associated with chlorophyll-a concentration in Lake Baiyangdian, North China*, Procedia Environmental Sciences, Vol. 13, pp. 1227-1237.
- [25] H. B. Fisher, E. J. List, R. C. Y. Koh, J. Imberger, N. H. Brooks (1979). *Mixing in inland and coastal waters*, Academic Press, New York.
- [26] M. Fukushima, Y. Oshima, M. Takeda (2010). *Dirichlet Forms and Symmetric Markov Processes*, De Gruyter studies in Mathematics, Vol. 19.
- [27] R. García, R. A. Kahawita (1986). *Numerical solution of the St. Venant equations with the MacCormack finite difference scheme*, International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol. 6, pp. 259-274.
- [28] I. I. Gihman, A. V. Skorohod (1972). *Stochastic Differential Equations*. Springer -Verlag Heidelberg, New York.
- [29] M. Hairer (2008). *Ergodic Theory for Stochastic PDEs*, Mathematics Institute, The University of Warwick.
- [30] A. W. Heemink (1990). *Stochastics modelling of dispersion in shallow water, Stochastic Hydrology and Hydraulics*, Springer-Verlag, Vol. 4, pp. 161-174.
- [31] I. Karatzas, S. E. Shreve (1991). *Brownian Motion and Stochastic Calculus*, Springer GTM (113), Second Edition, (1991).
- [32] A. Karr (1993). *Probability*, Springer -Verlag Heidelberg New York
- [33] V. Konakov, S. Menozzi and S. Molchanov (2010). *Explicit parametrix and local limit theorems for some degenerate diffusion processes*, Ann. Inst. Henri Poincaré Probab. Stat, Vol. 46, No. 4, pp. 908-923.
- [34] T. Lelièvre, M. Rousset and G. Stoltz (2010). *Free energy computations: a mathematical perspective*, Imperial College Press.
- [35] L. Li, Z. Binghu, L. Lusan (2010). *Biomonitoring and Bioindicators used for river ecosystems: Definitions, Approaches and Trends*, Procedia Environmental Sciences, Vol. 2, pp. 1510-1524.

- [36] P. L. Lions and A.S. Sznitman (1984). *Stochastic Differential Equations with Reflecting Boundary Conditions*, Comm. Pure and Applied Math. Vol XXXVII, 511-537.
- [37] R. W. MacCormack (1971). *Numerical solution of the interaction of a shock wave with a laminar boundary layer*, Lectures Notes in Physics, Springer-Verlag, Vol. 8, pp. 151-163.
- [38] J. Mattingly and A.M. Stuart (2002) *Geometric ergodicity of some hypo-elliptic diffusions for particle motions*, Markov Process. Related Fields, vol. 8 No. 2 , pp. 199-214.
- [39] S. P. Meyn and R. Tweedie (1993). *Stability of Markov processes II: continuous time processes and sampled chains*.
- [40] E. Nelson (1972). *Dynamical Theories of Brownian Motion*, Mathematical Notes, Princeton University Press.
- [41] I. Nobuyuki, S. Watanabe (1989). *Stochastic Differential Equations and Diffusion Processes*, North-Holland publishing company Amsterdam Oxford New York
- [42] B. Øksendal (1991). *Stochastic Differential Equations*, Springer -Verlag Heidelberg, New York
- [43] P. Ostapczuk, M. Burow, K. May, C. Mohl, M. Froning, B. Sübembach, E. Widmann, H. Emons (1997). *Mussels and algae as bioindicators for long-term tendencies of element pollution in marine ecosystems*, Chernosphere, Vol. 37, pp. 2049-2058,
- [44] R. V. Pearson, R. W. Barber (1996). *Modelling depth-integrated contaminant dispersion in the Humber Estuary using a Lagrangian particle technique*, Transactions on Ecology and Environment, WIT Press, Vol. 10, pp. 383-392.
- [45] E. Peña, M. Palacio, N. Ospina-Álvarez (2005). *Algas como indicadores de contaminación*, Universidad de Valle- Programa Editorial. Primera Edición, Colombia.
- [46] M. Reed and B. Simon (1978). *Analysis of Operators*, Vol IV, Academic Press New York.
- [47] G. O. Roberts and R. Tweedie (1996). *Exponential Convergence of Langevin Distribution and their Discrete approximations*, Bernoulli, Vol. 2, Issue 4, pp. 341-363.
- [48] I. K. Tsanis, U. Saied (2007). *A wind-driven hydrodynamic and pollutant transport model*, Global NEST Journal, Vol. 9, No. 2, pp. 117-131.
- [49] M. Valera-López, J. Guevara-Jordan, R. García, I. Saavedra, J. R. León (2014). *Understanding Circulation in Lake Valencia, Venezuela by a Shallow-Water Model*. Ingeniería y Ciencias Aplicadas: Modelos Matemáticos y Computacionales, SVMNI, pp. MM37- MM42.
- [50] M. Valera-López, A. Pineda, J. R. León (2017). *Application of satellite image to the implementation of two stochastic models for modeling the transport of chlorophyll-a on Lake Valencia (Venezuela)*, Journal de la Société Française de Statistique (JSFdS).
- [51] H. Van Dop, F. T. M. Nieuwstadt, J. C. R. Hunt (1985). *Random walk models for particle displacements in inhomogeneous unsteady turbulent flows*, Physics of Fluids, Vol. 28, pp. 1639-1653.
- [52] G. Viennet (1997). *Inequalities for absolutely regular sequences: application to density estimation*, Probab. Theory Relat. Fields, Vol. 107, pp. 467-492.
- [53] H. Zhuowei, L. Hongqi, Z. Lin, L. Feina (2010). *Quantitative inversion model of water chlorophyll-a based on spectral analysis*, Procedia Environmental Sciences. Vol. 10, pp. 523-528.
- [54] A. Szepessy (2011). *Langevin molecular dynamics derived from Ehrenfest dynamics*, Math. Models Methods Appl. Sci, Vol. 21, No. 11, pp. 2289-2334.

- [55] L. Wu (2001). *Large and moderate deviations and exponential convergence for stochastic damping Hamiltonian systems*, Stoch. Processes and Appl, Vol. 91, pp. 205-238.