Observação direta de nanopartículas em tempo real e análise de sua dinâmica estocástica através da equação de Langevin generalizada.

Rene A. N. Silva (PQ), Bruno F. Zornio (PG), Bruna de Lima (IC)*.

Resumo

Este estudo busca maior compreensão sobre a reação química de partículas em solução à um reagente através de processos estocásticos, que são processos aleatórios que dependem do tempo.

Palavras-chave:

processo estocástico, série temporal, análise espectral.

Introdução

O objetivo principal deste projeto é análise estatística de processos químicos em solução, baseando-se no modelo de dinâmica browniana para a descrição de reações químicas.

Foram utilizados dados experimentais (obtidos através da pinça ótica dupla desenvolvida por outros membros do grupo) os quais possuem ruído colorido, porém não possuem mudança de estados. Inicialmente, foram realizados estudos sobre a relação entre a densidade espectral e o periodograma. Posteriormente, foram testados vários modelos a fim de obter o que melhor se ajustava aos dados observados para mostrar a eficácia da metodologia utilizada em termos de previsão do processo. Este estudo busca mostrar que a metodologia de séries temporais é adequada para realizar previsões durante um curto período.

Resultados e Discussão

Neste trabalho foi utilizado o modelo SARIMA para ajustar os dados observados. Um dos modelos mais utilizados que consideram a sazonalidade de uma determinada série temporal, é o chamado modelo ARIMA sazonal, ou SARIMA. Estes modelos são importantes pois levam em consideração a sazonalidade estocástica dos dados. Quando o período $s = 12$, o modelo denominado SARIMA de ordem $(p, d, q) \times (P, D, Q)_{12}$, é dado por ^[1]:

$$\phi(X)\Phi(X^{12})\Delta^d\Delta_{12}^D Z_t = \theta(X)\Theta(X)\varepsilon_t$$

Pela Figura 1 nota-se que a série aparentemente não possui características como tendência ou sazonalidade e contém uma variabilidade instável.

Figura 1: Série temporal das observações.

Porém, através do gráfico da função de autocorrelação (Figura 2) podemos ver nitidamente uma sazonalidade nos dados.

Figura 2: Correlograma dos dados.

O modelo $SARIMA(2,0,2)X(1,2,0)_2$ se mostrou adequado para a previsão do comportamento da partícula em função do tempo (Figura 3).

Figura 3: Gráfico dos valores preditos pelo ajuste $SARIMA(2,0,2)X(1,2,0)_2$.

Conclusões

Foi apresentado neste trabalho que através da Metodologia de Séries Temporais é possível encontrar um modelo adequado para previsão como foi o caso do $SARIMA(2,0,2)X(1,2,0)_2$ que se mostrou satisfatório.

Agradecimentos

Agradeço ao Professor René Alfonso Nome e ao doutorando Bruno Fedosse Zornio pelo tempo dedicado a tirar quaisquer dúvidas e também ao CNPq pela oportunidade concedida.