# Universidade Estadual de Campinas

Instituto de Matemática, Estatística e

Computação Científica


Dissertação de Mestrado

# Título: Fenômenos de Localização em Passeio Aleatório com Potencial Aleatório


Autor: Marcelo Ventura Freire

Orientador: Hervé Jean François Guiol


Campinas, 12 de janeiro de 2001

# Fenômenos de Localização em Passeio Aleatório com Potencial Aleatório

Este exemplar corresponde à redação final da disseratção devidamente corrigida e defendida por Marcelo Ventura Freire e aprovada pela comissão julgadora.

Campinas, 12 de janeiro de 2000

Hervé Jean François Guiol
Orientador

Banca Examinadora:

1) Prof. Dr. Hervé Jean François Guiol – Orientador – IMECC/UNICAMP
2) Prof. Dr. Luiz Renato Gonçalves Fontes – IME/USP
3) Profa. Dra. Nancy Lopes Garcia – IMECC/UNICAMP

Dissertação apresentada ao Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, UNICAMP, como requisito parcial para obtenção do Título de MESTRE em ESTATÍSTICA.

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA

BIBLIOTECA CENTRAL DA UNICAMP

| | |
|---|---|
| F883f | Freire, Marcelo Ventura<br>Fenômenos de localização em passeio aleatório com potencial aleatório / Marcelo Ventura Freire. – Campinas, SP: [s.n.], 2000.<br><br>Orientador: Hervé Jean François Guiol.<br>Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica.<br><br>1. Passeio aleatório. 2. Processo estocástico I. Guiol, Hervé Jean François. II. Universidade Estadual de Campinas. Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica. III. Título. |

**Dissertação de Mestrado defendida em 12 de dezembro de 2000 e aprovada**

**Pela Banca Examinadora composta pelos Profs. Drs.**

**Prof (a). Dr (a). HERVÉ JEAN FRANÇOIS GUIOL**

**Prof (a). Dr (a). NANCY LOPES GARCIA**

**Prof (a). Dr (a). LUIZ RENATO GONÇALVES FONTES**

# Agradecimentos

Gostaria de agradecer imensamente às pessoas que permitiram a conclusão dessa dissertação e que tornaram a minha passagem pela Unicamp bem mais divertida.

Primeiramente, à minha família por vários motivos: a quem devo minha existência, minha criação, meus princípios, meus valores; por nunca terem duvidado por um instante sequer e sempre terem dado o apoio que a distância permitia. Agradeço a minha madrinha Nely Ferraz, a minha mãe Syrley Ventura e a meu pai Loidmar Freire.

A eles, dedico esse trabalho.

Agradeço ao meu orientador, Professor Doutor Hervé Guiol, pela paciência de monge budista demonstrada comigo (por que eu sou muito chato; quem me conhece pode atestar), pelo profissionalismo demonstrado, pela amizade desenvolvida, pela compreensão utilizada e pela oportunidade de trabalhar com uma pessoa que aprendi a respeitar demais.

Agradeço à minha namorada, Marta Spazapan, por todo o carinho, força, companheirismo, dedicação, altruísmo, graça e por tantas outras formas de se dar que nem sei dizer.

Agradeço à UNICAMP, ao IMECC, ao Departamento de Estatística e a todos os seus professores e funcionários por ter sido aceito para o programa de pós-graduação; agradeço à CAPES pelo seu apoio financeiro e ao CENAPAD-SP (projeto UNICAMP / FINEP – MCT), com cujo auxílio e recursos computacionais desenvolvi a parte computacional da dissertação.

Agradeço a todos os professores e alunos do Departamento, em especial ao Professor Doutor Mauro Marques (a cujas aulas, eu tive a honra de poder assistir) e à sua esposa, Professora Doutora Eliana Marques, que primeiramente me receberam em Campinas; aos Professores Doutores Armando

Infante, Hildete e Aluísio Pinheiro pela atenção com que sanaram minhas dúvidas; aos alunos Anderson Motta, Fernando Colugnati e Viviane Guerra, meus amigos e colegas, com os quais passei pelo desafio em que consiste o mestrado.

Agradeço à Professora Inez Chaves e à Professora Doutora Pilar de Massaguer, por terem sempre acreditado na minha capacidade e ao Professor Doutor Pablo Ferrari pelas conversas esclarecedoras

Agradeço aos membros da banca examinadora da minha dissertação, os Professores Doutores Luiz Renato Fontes e Nancy Lopes Garcia, pelas correções e sugestões de acréscimos que, com certeza, enriqueceram muito esse trabalho.

Agradeço a todos os amigos que encontrei e que me encontraram em Campinas, principalmente, a Sileno Rocco (Tio Chico), a Rosimeire Diógenes, a Paula Mesquita (Tia Póia) e a Angela Romanini pela amizade sincera; a Márcio Ribas (Marcião e a pick-up que nasceu colada em seu corpo), a André Bastos (Covic) e demais galera do R.P.G. pelas sessões de terapia do riso e por quebrarem a monotonia do dia-a-dia; e ao nobre povo do Oficina Coral, que me rendeu tantos motivos de alegria ao longo desse tempo.

Agradeço a Rodrigo Ribeiro, Luiz Alexandre Ribeiro e Alexandre Carvalho, meus queridos irmãos que ficaram no Rio de Janeiro e que nunca deixaram a amizade esmorecer pela distância.

Agradeço também a todas as pedras de tropeço no caminho, por não terem conseguido ser melhores que eu. (Ha, ha, ha! Eu consegui, suas trouxas!)

E, por fim, agradeço a mim mesmo, sem o qual nada disso teria acontecido. : - )

Campinas, 2 de novembro de 2000

M.V.F.

# Resumo

Esse trabalho estuda o fenômeno de localização do passeio aleatório $\mathbf{S} = (S_n; n \in \mathbb{Z})$ simples simétrico unidimensional quando da presença de um potencial aleatório dado pela interação aleatória $\mathbf{Y} = (Y_n; n \in \mathbb{Z}) \in \{-1, 1\}^{\mathbb{Z}}$ com o meio onde passeio se desenvolve e pelo parâmetro $\varepsilon \in [0, \infty)$ que mede a força desta interação e também confronta os casos dos passeios com e sem potencial aleatório.

# Abstract

This work addresses the exponential localization of the symmetric simple random walk $\mathbf{S} = (S_n; n \in \mathbb{Z})$ with random potential given by the random interaction $\mathbf{Y} = (Y_n; n \in \mathbb{Z}) \in \{-1, 1\}^{\mathbb{Z}}$ with the environment in which the random walk flows and by the parameter $\varepsilon \in [0, \infty)$ which measures the strength of this interaction and, at last, the random walk with and without the interaction with the environment are compared.

# Sumário

# Lista de Figuras

# Lista de Tabelas

# Capítulo 1

# Apresentação

Esse trabalho se dedica ao estudo do fenômeno de localização do passeio aleatório simples simétrico unidimensional quando da presença de um potencial aleatório.

Os capítulos e seus conteúdos são descritos a seguir. Esse trabalho foi desenvolvido sob orientação de que o leitor leia-os em ordem, porém alguns trechos do texto podem ser saltado sem maior prejuízo de compreensão, principalmente pelo leitor já acostumado com o assunto, desde que atenção seja dada para os destaque do texto mencionados a diante.

**Capítulo 2** Este capitulo é uma apresentação do modelos de passeio aleatório, com maior ênfase para o caso simples simétrico, e uma fonte de resultados que serão úteis nos capítulos seguintes.

Chama-se a atenção do leitor a *seção 2.4*, pois nela são feitas considerações qualitativas que permitem de comparar o comportamento do passeio aleatório simétrico simples com o passeio com potencial descrito no capítulo 4.

**Capítulo 3** Esse capítulo introduz informalmente o conceito de potencial, define o conceito de localização exponencial na *seção 3.2*, define o potencial aleatório usado em [Sinai, 1993] e ilustra sua influência no comportamento do passeio com potencial aleatório.

**Capítulo 4** Este capítulo estuda os resultados apresentados por [Sinai, 1993] sobre a localização do passeio aleatório com potencial aleatório proposto por [Garel et al., 1989] e a *seção 4.2* confronta seu comportamento com o descrito na seção 2.4. As questões que permaneceram sem resposta e as novas que surgiram se encontram na última seção do capítulo.

**Capítulo 5** No princípio, cogitava-se em fazer uma parte da dissertação dedicada à simulação do modelo de passeio estudado no capítulo 4. Com esse objetivo, começou-se a trabalhar no programa descrito a seguir, já tendo em vistas sua inclusão nos esforços da dissertação.

Uma das descobertas do trabalho desenvolvido (pelo menos para o autor) foi o fato de que fazer uma simulação de um modelo como o estudado, descrito por uma medida de Gibbs, por si só já é assunto mais que suficiente para escrever outra dissertação de mestrado, por ter que empregar as recentes e refinadas técnicas de simulação perfeita.

Porém, quando da descoberta, bastante tempo e esforço já havia sido empregados de forma frutífera nesse subprojeto da dissertação. Seria injusta a exclusão de algo que foi importante no processo de aprendizado geral sobre sistemas de partículas interagentes.

Assim, esse capítulo é reservado para uma sucinta apresentação desse parte computacional do trabalho.

**Apêndices A e B** Nesses apêndices, encontram-se as listagens dos programas empregados para gerar as tabelas do capítulo 3 e das simulações de passeio aleatório sem potencial das figuras 2.7, 2.8 e 2.9 (em *S-Plus* e *Mathematica* respectivamente). Nenhum grande destaque pode ser dado a esses programas, porém suas listagens foram incluídas apenas por motivos didáticos.

**Apêndice C** Nesse apêndice, estão as imagens de uma execução típica do programa *s3*. Por essas figuras se destinarem mais à ilustração do funcionamento do programa e dos módulos relacionados com essa dissertação do que à documentação completa e exaustiva do programa e de todos os seus módulos, somente o módulo de Processo de Exclusão foi acompanhado passo a passo.

# Parte I

# Passeio Aleatório com Potencial Aleatório

# Capítulo 2

# O Passeio Aleatório

Este capitulo tem dois objetivos: o de ser uma apresentação, para o leitor neófito, dos passeios aleatórios dando um maior enfoque sobre o caso simples simétrico e o de ser uma fonte de resultados que serão úteis nos capítulos seguintes.

Para tanto, será apresentado brevemente o modelo geral de passeio aleatório, dando-se a cada vez um exemplo ilustrativo de sua aplicação direta ou mais complexa. Para o passeio simétrico simples, serão revisadas propriedades fundamentais suas que, no capitulo 4, servirão de referência.

Destaca-se, em particular, que, na última seção, serão feitas algumas considerações qualitativas a fim de comparar o comportamento do passeio aleatório simétrico simples com o passeio com potencial descrito nos capítulos a seguir.

## 2.1 Introdução

A importância do modelos de passeios aleatórios não é devida à sua aplicação direta na modelagem de processos (mesmo embora isso possa ser feito, algumas vezes como uma primeira abordagem de um problema), mas sim ao fato de surgir várias vezes inserido dentro de situações e modelos mais complexos, de forma que o estudo de suas característica e de seu comportamento é justificado por serem ferramentas valiosas na compreensão e na obtenção de resultados de outros modelos de processos estocásticos.

Entende-se por *Modelo de Passeio Aleatório*, conforme [Durrett, 1996], o sistema definido pela família $(X_n; n \in T)$ de variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas, definidas no *espaço de estados* $E$ e pelo processo estocástico $(S_n; n \in T)$ definido por $S_0 = x_0 \in E$ e $S_n := S_{n-1} + X_n$, onde o conjunto de índices $T$ (tempos) pode ser $\mathbb{N}$ ou $\mathbb{Z}$ e o espaço de estados $E$ pode ser $\mathbb{N}$, $\mathbb{Z}$, $\mathbb{N}^d$ ou $\mathbb{Z}^d$. As variáveis $S_n$ podem ser interpretadas como a posição de uma partícula no instante $n$ e as variáveis $X_n$ como o movimento feito pela partícula entre os instantes $n-1$ e $n$.

O modelo também pode ser definido também tendo $\mathbb{R}$ ou $\mathbb{R}^d$ por estado de espaços $E$ e pode também ser em tempo contínuo, tendo $T = \mathbb{R}^+$ ou $\mathbb{R}$, porém tal generalidade não será necessária nesse trabalho.

Considerando o espaço de estados $E = \mathbb{Z}^d$, o passeio é dito *simétrico* quando

$$\mathbb{P}(X_i = k) = \mathbb{P}(X_i = -k) \quad \text{para } k \in E;$$

ele é dito *unidimensional* se $d = 1$ e *d-dimensional* se $d > 1$ e é dito *simples* se

$$\mathbb{P}(|X_i| = 1) = 1.$$

Uma das característica notáveis do passeio aleatório é que ele pode ser visto como uma cadeia de Markov com probabilidade de transição

$$\begin{aligned}\mathbb{P}\left(S_{n+1}=y|S_1=x_1,...,S_n=x_n\right)&=\mathbb{P}\left(S_{n+1}=y|S_n=x_n\right)\\&=\mathbb{P}\left(X_{n+1}=y-x_n\right)=\mathbb{P}\left(S_1=y-x_n|S_0=0\right),\end{aligned}$$

temporalmente homogênea e invariante por translação.

Um dos modelos de passeio aleatório (com condição de bordo) mais antigo a ter sido estudado é a *Ruína do Jogador*, que se encontra presente em quase todo livro-texto de probabilidade. Nesse modelo, um *jogador* começa a disputar contra uma *banca* uma seqüência de partidas de um jogo de azar, que poderia ser, por exemplo, um jogo de cara ou coroa. Supõe-se que o jogador vença cada partida com probabilidade $p$ e de forma independente de todas as outras partidas. Além disso, o jogador tem uma quantidade inicial de dinheiro $a$. Se o jogador vence uma partida, ele ganha uma unidade de dinheiro da banca e, caso perca, ele entrega uma unidade à banca. O jogo acaba quando o jogador chega à ruína, i.e., na primeira vez que a sua quantidade de dinheiro chega a zero.

Assim, considerando a quantidade $S_n \in \{0,1,2,\dots\}$ de dinheiro que o jogador tem no instante $n \in \mathbb{N}$ e o ganho $X_n \in \{-1,+1\}$ do jogador na $n$-ésima jogadas, o modelo da Ruína do Jogador pode ser descrito por

$$S_{n+1}=\begin{cases}0 & \text{se } S_n=0,\\ S_n+X_{n+1} & \text{se } S_n>0.\end{cases}$$

Essa seqüência $(S_n)$ pode ser expressa como uma cadeia de Markov com o conjunto

$\{0, 1, 2, \dots\}$ por espaço de estados e com matriz $Q$ de transição como a descrita abaixo

$$Q = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1-p & 0 & p & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1-p & 0 & p & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1-p & 0 & p & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}.$$

Uma variação desse modelo pode ser obtida se for considerado que a banca possui uma quantia inicial $b$ de dinheiro e que o jogo acaba se o jogador ou a banca chegam à ruína. Nesse caso, o modelo pode ser expresso por

$$S_{n+1} = \begin{cases} 0 & \text{se } S_n = 0, \\ S_n + X_{n+1} & \text{se } 0 < S_n < a+b, \\ a+b & \text{se } S_n = a+b, \end{cases}$$

ou através da cadeia de Markov com estado de espaços $\{0, 1, \dots, a+b\}$ e com matriz $q$ de transição dada por

$$Q = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1-p & 0 & p & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1-p & 0 & p & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1-p & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1-p & 0 & p & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1-p & 0 & p \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Além da modelagem direta, como já foi dito, os resultados de passeios aleatórios são utilizados também dentro de outros processos mais complexos. Para ilustrar o emprego

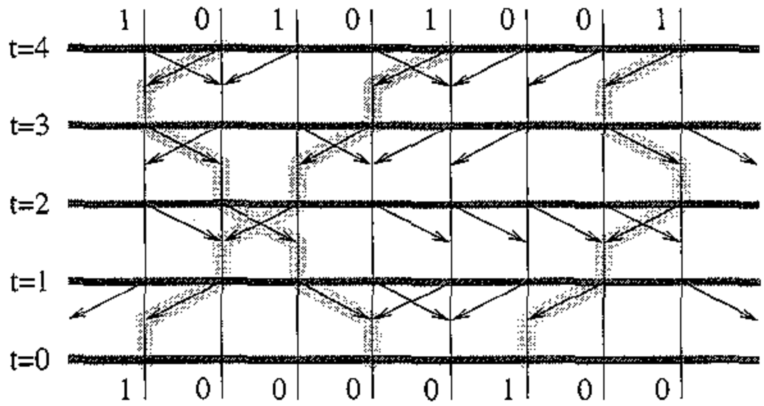


Figura 2.1: Mudança de opinião no modelo do votante em tempo discreto

de resultados de passeios aleatório dentro de um sistema mais complexo, menciona-se sem muitos detalhes o modelo seguinte.

Um exemplo desse situação onde há um passeio aleatório escondido dentro de um sistema mais complexo é o chamado *Modelo do Votante Discreto* (que é um modelo de autômato celular probabilístico), em que cada sítio de um reticulado $L$ (tipicamente $L = \mathbb{Z}^d$ ou uma parte dele) tem uma opinião inicial dentro de um espaço $E = \{0, 1\}$ de opiniões possíveis (respectivamente *contra* ou *a favor*) e que, após cada instante $n$, esse indivíduo assume a opinião de um dos seus vizinhos mais próximos escolhido aleatoriamente. Assim, estuda-se a família de variáveis aleatórias $(X_n(u); n \in T, u \in L)$ que assumem valores em um espaço de estados $E$.

A propagação da opinião de um sítio $u$ no tempo $m$ até um sítio distante $v$ no tempo $n > m$ pode ser visto dualmente como o movimento de uma partícula em $v$ no tempo 0 seguindo um passeio aleatório chegando no ponto $u$ no tempo $n - m$. Para maior detalhe, veja o Capitulo 8 de [Ferrari and Galves, 1997].

Para essa dissertação, o nosso modelo de referência será o de passeio aleatório simétrico simples em dimensão um: *i.e.* em $\mathbb{Z}$.

## 2.2 O Passeio Simétrico Simples em $\mathbb{Z}$

Considere a seqüência $\mathbf{X} = (X_n; n \in \mathbb{N})$ de variáveis aleatórias i.i.d. tais que $\mathbb{P}(X_1 = 1) = 1 - \mathbb{P}(X_1 = -1) = p \in (0,1)$. Denomina-se por *passeio aleatório* a seqüência $\mathbf{S} = (S_n; n \in \mathbb{Z})$ de variáveis aleatórias em $\mathbb{Z}$ tais que,

$$S_n = \begin{cases} 0 & \text{se } n = 0 \\ \sum_{k=1}^{n} X_k & \text{se } n > 0 \\ -\sum_{k=n+1}^{0} X_k & \text{se } n > 0 \end{cases}$$

por convenção, $S_0 = 0$ e, para $n > 0$, $S_n = \sum_{k=1}^{n} X_k$ e $S_{-n} = -\sum_{k=-n+1}^{0} X_k$.

Mesmo embora o passeio possa ter sua origem em qualquer ponto finito de $\mathbb{Z}$, por convenção assume-se que sua origem será o ponto $0 \in \mathbb{Z}$, e define-se, a partir dessa condição fixa, o tempo $Z_s := \inf\{k \in \mathbb{N} : k > 0, S_k = s\}$ de *primeira passagem* por $s$ e o tempo $U_n := \max\{k \in \mathbb{N} : k \leqslant n, S_k = 0\}$ de *última passagem pela origem* entre os instantes 0 e $n$.

Se $\mathbb{P}(X_n = 1) + \mathbb{P}(X_n = -1) = 1$, o passeio será dito *simples* e, nesse caso, define-se $p := \mathbb{P}(X_n = 1) = 1 - \mathbb{P}(X_n = -1)$. Se, além de simples, ocorrer $p = 1/2$, o passeio será chamado de simétrico.

## 2.3 Resultados Úteis do Passeio Simétrico em $\mathbb{Z}$

Os resultados a seguir foram extraídos de [Grimmett and Stirzaker, 1992]. Nessa obra, o leitor interessado poderá encontrar as demonstrações dos resultados apresentados.

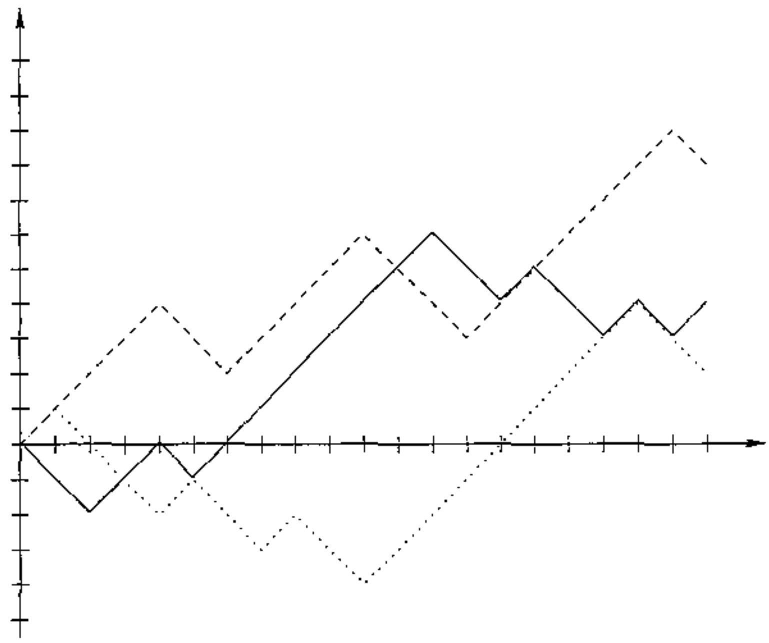

Figura 2.2: Três exemplos de trajetórias de um passeio aleatório simples simétrico

Considero, neste trabalho, as clássicas notações $O(\cdot)$ e $o(\cdot)$ segundo as quais, dadas duas funções $f$ e $g$, denota-se $f(x) = O(g(x))$ (e diz-se $f(x)$ é de ordem não-superior a $g(x)$) se $\lim f(x)/g(x)$ for limitado por alguma constante e denota-se $f(x) = o(g(x))$ (e diz-se $f(x)$ é de ordem inferior a $g(x)$) se $\lim f(x)/g(x) = 0$ (sendo o valor de convergência de $x$ escolhido convenientemente conforme o contexto).

**Teorema 2.1.** *Para o passeio aleatório simétrico simples, valem os seguintes resultados*

$$\mathbb{P}(S_n = s) = \binom{n}{\frac{n+s}{2}} 2^{-n}$$

$$\mathbb{P}(S_1 \cdot \ldots \cdot S_n \neq 0, S_n = s) = \frac{|s|}{n} \mathbb{P}(S_n = 0)$$

$$\mathbb{E}(|S_n|) = n \cdot \mathbb{P}(S_1 \cdot \ldots \cdot S_n \neq 0) \tag{2.1}$$

**Teorema 2.2.** *Para o passeio simétrico simétrico simples em $\mathbb{Z}$, vale*

$$\mathbb{P}(\textit{Voltar à origem em algum instante}) = \sum_{k=1}^{\infty} \mathbb{P}(Z_0 = k) = 1$$

$$\mathbb{E}(Z_0) = \infty = \textit{Tempo esperado até que ocorra a volta à origem},$$

*ou, de outra forma, o passeio aleatório simples simétrico é recorrente nulo.*

**Teorema 2.3.** *(Lei do Arco Seno) Para o passeio simétrico, tem-se que*

$$\mathbb{P}(S_1 \cdot \ldots \cdot S_{2n} \neq 0) = \mathbb{P}(S_1 \cdot \ldots \cdot S_{2n+1} \neq 0) = \mathbb{P}(S_{2n} = 0)$$

*donde obtém-se que a probabilidade de que o último retorno $U_{2n}$ à origem até o instante $2n$ seja o instante $2k$ é dada por*

$$\mathbb{P}(U_{2n} = 2k) = \mathbb{P}(S_{2k} = 0, S_{2k+1} \cdot \ldots \cdot S_{2n} \neq 0) = \mathbb{P}(S_{2k} = 0) \cdot \mathbb{P}(S_{2n-2k} = 0),$$

*donde obtém-se uma convergência em distribuição associada esse tempo de último retorno à origem $U_{2n}$, dada por*

$$\begin{aligned}\mathbb{P}\left(\frac{U_n}{n} \leqslant \alpha\right) &\underset{n\to\infty}{\longrightarrow} \frac{1}{\pi}\int_0^\alpha \frac{1}{\sqrt{t(1-t)}}dt \\ &= \frac{2}{\pi}\arcsin\sqrt{\alpha}\end{aligned}$$

*para $\alpha \in (0,1)$.*

Dessa forma, $U_n/n$ converge em distribuição a uma variável aleatória $Z$ com distribuição Beta$(-1/2,-1/2)$, que é definida no intervalo $[0,1]$ e tem por função de distribuição acumulada

$$F_Z(z) = \frac{2}{\pi}\arcsin\sqrt{z} = \frac{1}{\beta(-1/2,-1/2)}\int_0^z x^{-1/2}(1-x)^{-1/2}dx,$$

ilustrada pelo gráfico à esquerda da figura 2.3. O gráfico à direita ilustra a sua função densidade e permite concluir que, para $n$ suficientemente grande, o passeio aleatório $\mathrm{s}^{(0,n)}$ geralmente passa por zero pela última vez ou bem próximo ao seu início ou bem próximo ao seu fim, no instante $n$.

**Teorema 2.4.** *Com a notação anterior,*

$$\mathbb{P}(S_n = 0) < \frac{1}{\sqrt{n}}$$

$$\mathbb{P}(S_1 \cdot \ldots \cdot S_{n-1} \neq 0, S_n = 0) = \frac{1}{n-1}\mathbb{P}(S_n = 0) \simeq const \cdot n^{-3/2} = O(n^{-3/2}). \qquad (2.2)$$

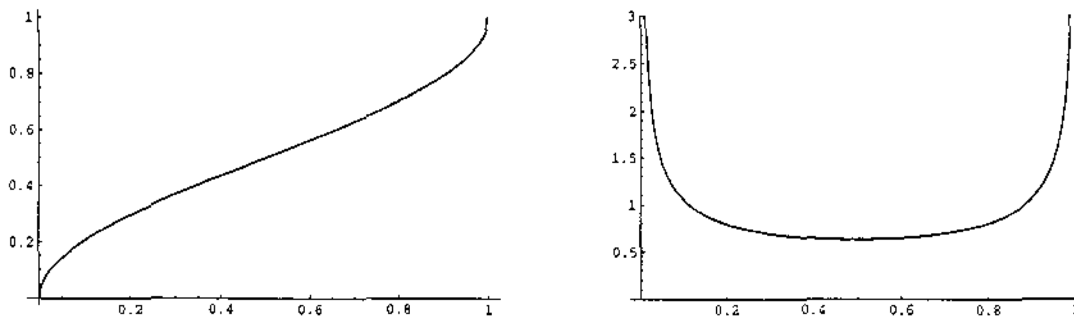

Figura 2.3: O comportamento das funções $F(x) = \frac{2}{\pi}\arcsin(\sqrt{x})$ e $f(x) = (\pi x(1-x))^{-1}$

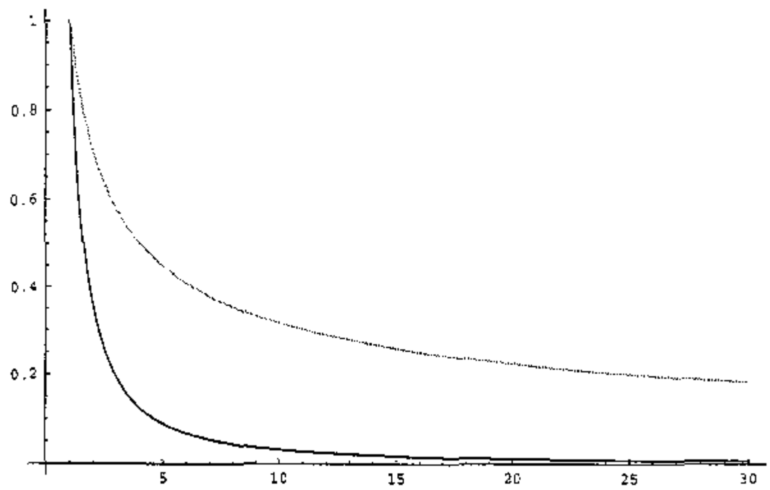

Figura 2.4: O comportamento das funções $f(x) = x^{-1}$ e $g(x) = x^{-3/2}$

Para comparar a velocidade com que essas estimativas vão a zero, considere a figura 2.4, em que a função $f(x) = x^{-1}$ é apresentada em cinza claro e a função $g(x) = x^{-3/2}$ é apresentada em preto.

## 2.4 A Não Localização do Passeio Simétrico Simples em $\mathbb{Z}$

As considerações dessa seção serão caracterizações que ilustrarão a diferença fundamental entre os passeios aleatórios com e sem o potencial aleatório.

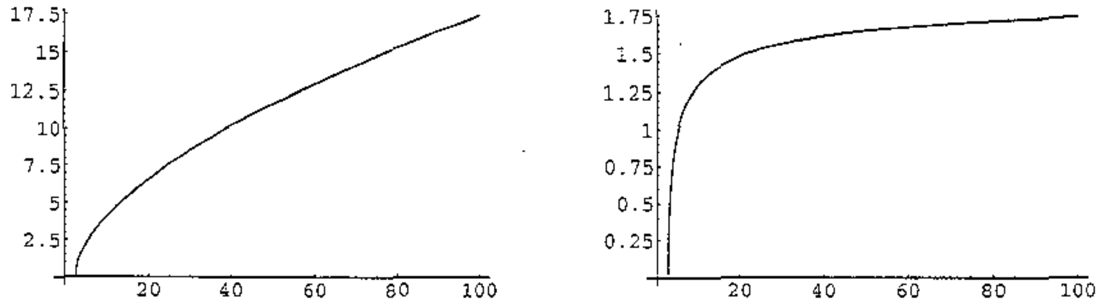


Figura 2.5: As funções $f(x) = \sqrt{2x \log\log x}$ e $f(x) = \sqrt{2 \log\log x}$

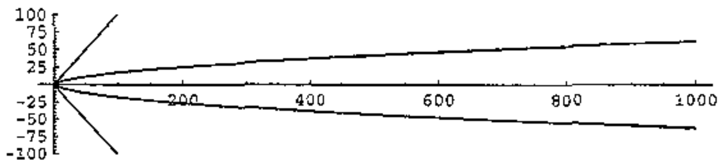


Figura 2.6: As funções $f(x) = \pm\sqrt{2n \log\log n}$ comparadas com $f(x) = \pm x$

Observe que as variáveis $X_n$ são i.i.d. e que $\mathbb{E}(X_n) = 0$ e $Var(X_n) = 1$ para todo $n$, de forma que, para o passeio aleatório simétrico simples unidimensional, pela *Lei Forte dos Grandes Números*, tem-se que

$$\frac{S_n}{n} \xrightarrow{qc} 0,$$

pelo *Teorema Central do Limite*, tem-se que

$$\frac{S_n}{\sqrt{n}} \xrightarrow{\mathcal{D}} \text{Normal}(0, 1)$$

e, pela *Lei dos Logaritmos Iterados* (conforme [Grimmett and Stirzaker, 1992, p.302]), tem-se que

$$\mathbb{P}\left(\limsup_{n\to\infty} \frac{S_n}{\sqrt{2n \log\log n}} = 1\right) = 1 \tag{2.3}$$

e, por simetria, $\liminf_{n\to\infty} S_n/\sqrt{2n \log\log n} \stackrel{qc}{=} -1$.

Expondo de outra forma, para $c \in \mathbb{R}^+$ fixo, seja a seqüência de eventos

$$A_n := \left[\left|\frac{S_n}{\sqrt{2n \log\log n}}\right| \geqslant c\right].$$

| $n$ | $\sqrt{2\log\log 10^n}$ |
|---|---|
| 1 | 1,29154 |
| 5 | 2,21064 |
| 10 | 2,50464 |
| 50 | 3,08093 |
| 100 | 3,29824 |
| 308 | 3,62329 |

Tabela 2.1: Alguns valores de $\sqrt{2\log\log n}$

Para $c \geqslant 1$, os eventos $A_n$ só poderão ocorrer para um número finito valores de $n$ com probabilidade 1 e, para $c < 1$, eles quase certamente ocorrerão infinitas vezes.

Assim, pela Lei Forte do Grandes Números, a seqüência $S_n/n$ convergirá quase certamente a zero ao passo que, pelo Teorema Central do Limite, a seqüência $S_n/\sqrt{n}$, mesmo assintoticamente, flutuará aleatoriamente, estando sujeita a possíveis porém raros desvios significativos do eixo das abscissas. Contudo, $|S_n|$ não poderá ser maior que $\sqrt{2n\log\log n}$ para $n$ grande o suficiente e os desvios de $|S_n|/\sqrt{n}$ não ultrapassarão $\sqrt{2\log\log n}$ senão um número finito de vezes.

Mesmo apesar de seu crescimento lento (cf. tabela 2.1), as seqüências $\sqrt{2\log\log n}$ e $\sqrt{2n\log\log n}$ não são cotadas, o que acarreta na inexistência de um $M \in \mathbb{R}^+$ tal que $\mathbb{P}\left(|S_n| < M, \forall n \in \mathbb{N}\right) = 1$; muito pelo contrário, tal evento tem probabilidade nula. Isso caracteriza a *não-localização* no passeio aleatório simples simétrico. As figuras 2.9 e 2.8 mostram o comportamento em relação a esses majorantes nos dados de duas simulações.

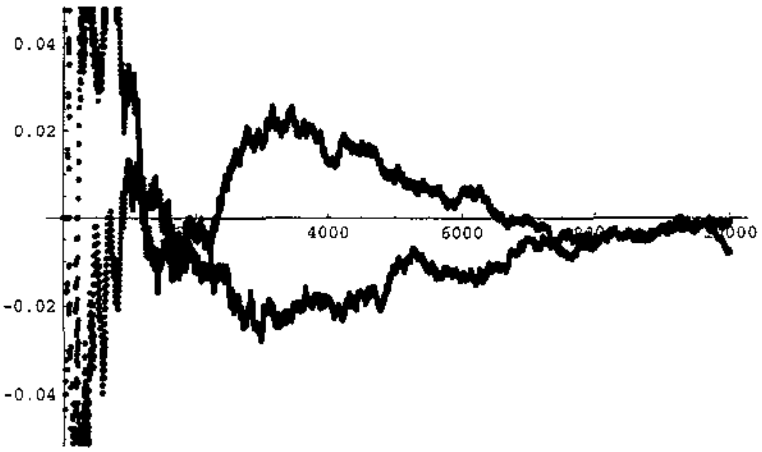


Figura 2.7: O comportamento de $S_n/n$

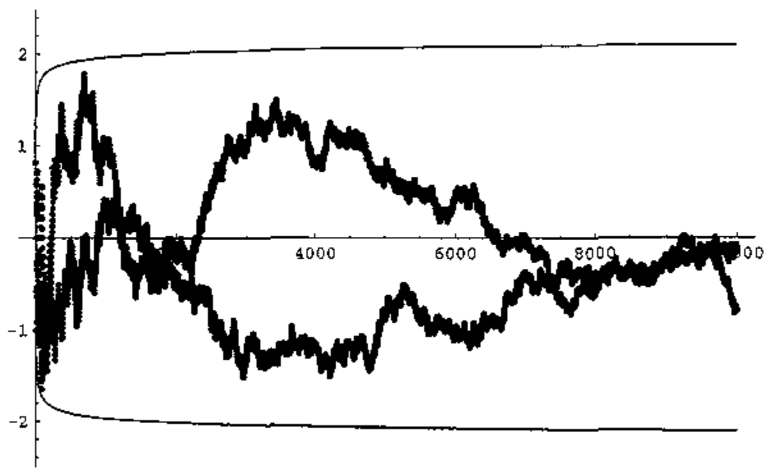


Figura 2.8: O comportamento de $S_n/\sqrt{n}$ comparado a $\sqrt{2 \log \log n}$

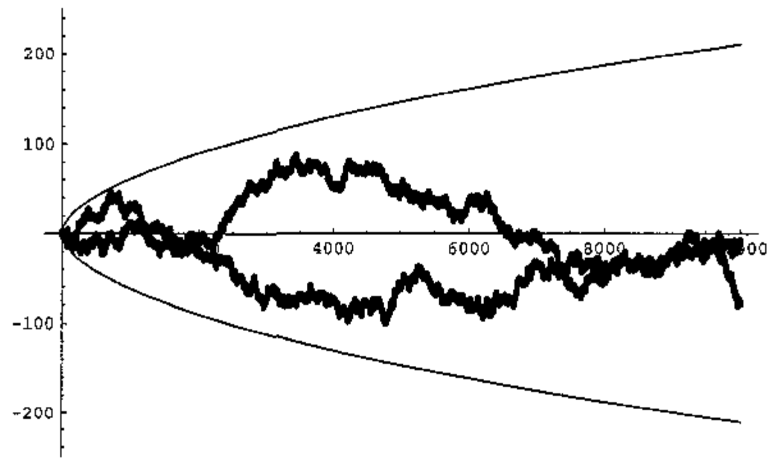


Figura 2.9: O comportamento de $S_n$ comparado a $\sqrt{2n \log\log n}$

# Capítulo 3

# O Potencial Aleatório

O capítulo anterior estudou o comportamento do passeio aleatório simples unidimensional. O objetivo desse capítulo é introduzir o conceito de potencial e ilustrar sua influência no comportamento do passeio com potencial aleatório.

## 3.1 Interpretação Física

Basicamente, considera-se a região de interface entre dois meios, v.g., entre água e óleo, e um polímero formado por dois tipos de monômeros, um *hidrófilo* e um *hidrófobo*.

A ordem com a qual os monômeros se concatenam é aleatória e cada monômero tem probabilidade 1/2 de ser hidrófilo ou hidrófobo independentemente dos seus vizinho. As ligações são feitas em ângulos de $\pm 45°$ com probabilidade 1/2 para cada inclinação independentemente de tudo mais.

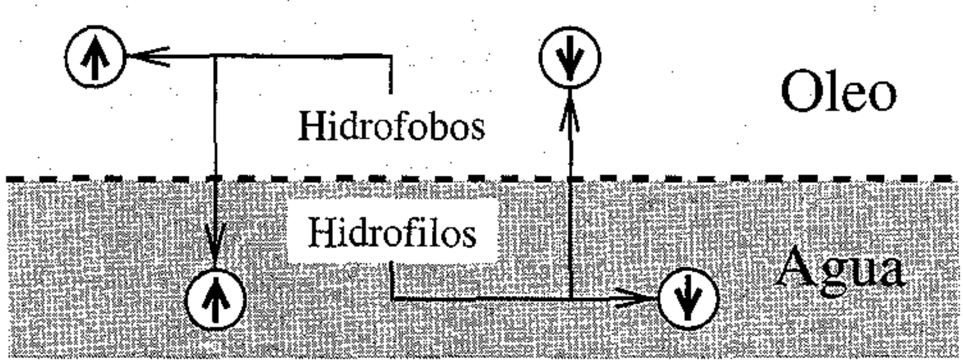


Figura 3.1: Monômeros nos dois meios distintos

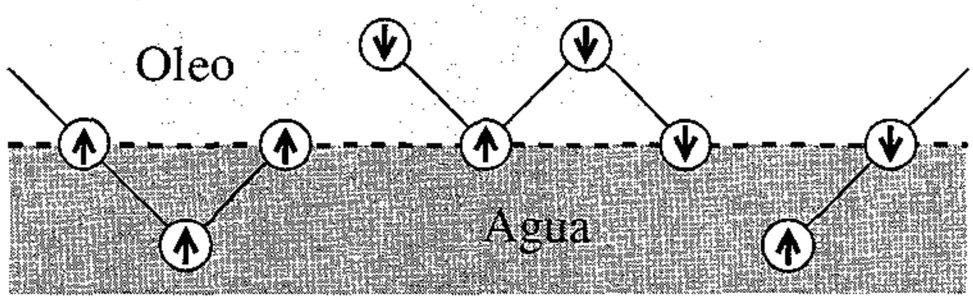


Figura 3.2: Polímero em formação

A intensidade da atração e repulsão que o meio exerce nos monômeros é dada por um parâmetro $\varepsilon$.

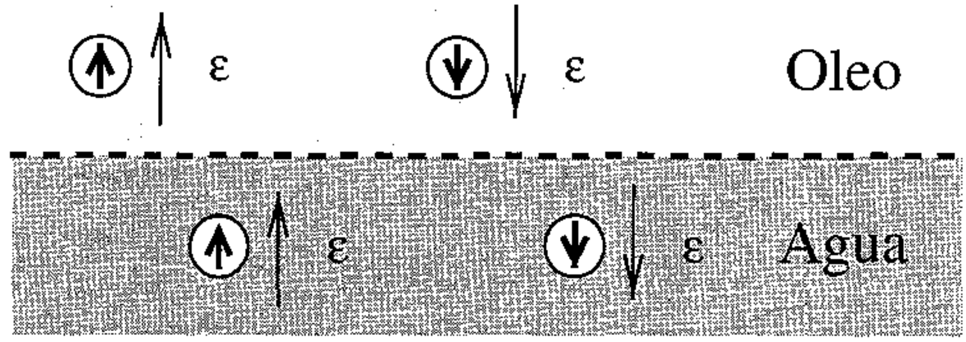


Figura 3.3: A afinidade dos monômeros com os meios

De forma simplificada, a ligação entre os monômeros pode ser vista como um passeio aleatório unidimensional, onde a interface dos meios determina a origem do eixo das ordenadas, conforme pode ser visto na figura 3.4.

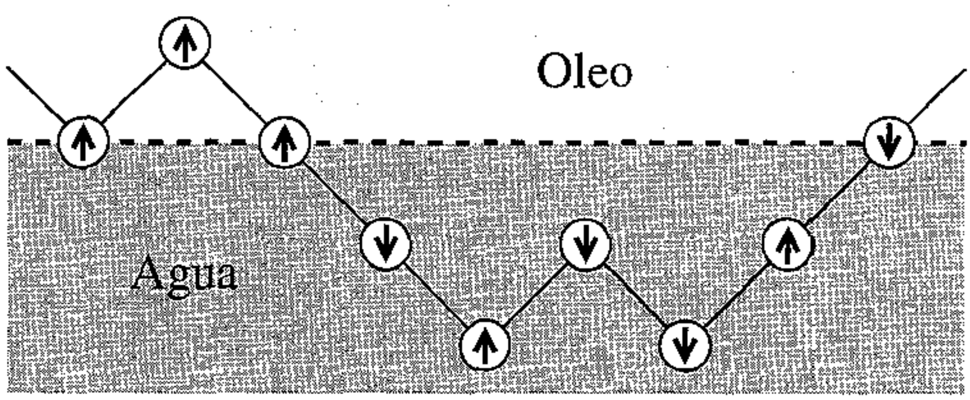


Figura 3.4: Um polímero visto como um passeio aleatório

A probabilidade de uma configuração em particular se formar é maior quanto menor for a repulsão e maior for a atração exercida pelo meio no monômeros, as quais são sumarizadas por uma grandeza que será chamada *potencial* e que é função da trajetória e da disposição dos monômeros. Assim, conforme a disposição dos monômeros, alguns passeios terão maior chance de ocorrerem que outros, conforme as figuras 3.5 e 3.6.

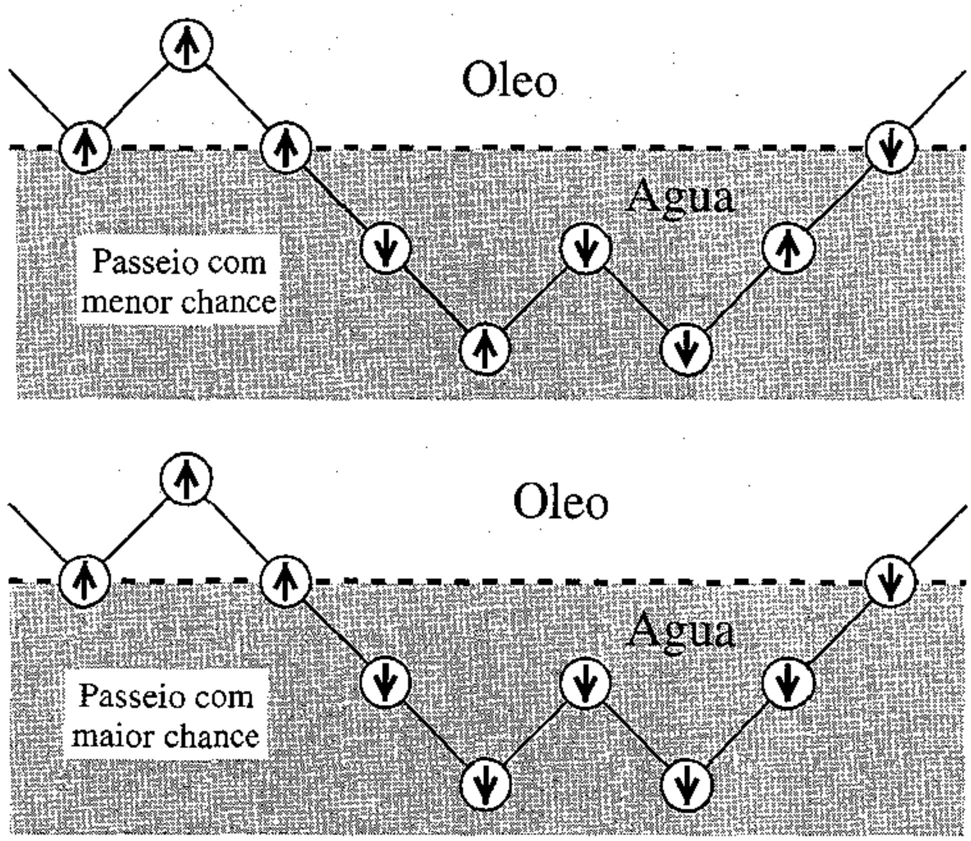


Figura 3.5: A influência da afinidade entre os monômeros e o meio sobre a chance de ocorrência de uma realização de passeio

Na figura 3.5, vê-se a mesma trajetória realizada por disposições diferentes de monômeros. Na figura superior, ocorre um pouco de repulsão por causa dos monômeros das quinta e oitava posições, que estão em meio com o qual não possuem afinidade, ao passo que, na inferior, todos os monômeros estão nos seus meios favoritos.

Na figura 3.6, vê-se duas trajetórias distintas, porém realizadas pela mesma disposição de monômeros, sendo que, na figura superior, do quarto monômero ao oitavo, apenas dois monômeros estão em seus meios favoritos contra três que não estão no seu meio favorito, ao passo que, na figura inferior, do quarto monômero ao nono, apenas dois não estão em meio

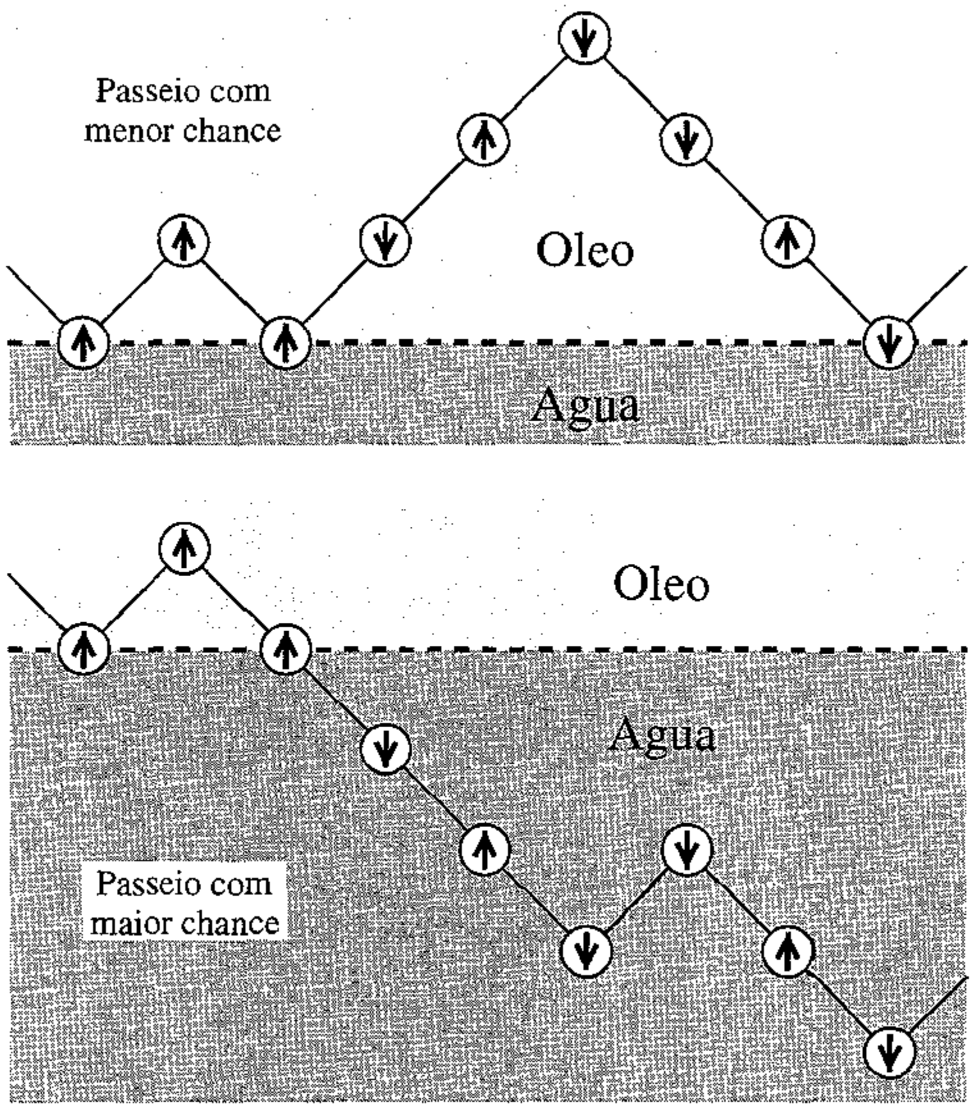


Figura 3.6: Realizações diferentes de um passeio com a mesma disposição de monômeros

de seu agrado contra quatro que estão em seu meio favorito.

## 3.2 Localização Exponencial

Nesse quadro, seria possível dizer informalmente que um passeio estaria *localizado* se ele ficasse confinado a uma região finita em torno da interface dos meios. Do contrário, se o passeio puder sair da vizinhança da interface e enveredar através de um dos meios, então diz-se que ele é *não-localizado*.

Mais rigorosamente, ocorre a *localização exponencial* se a probabilidade do passeio estar se desviando muito da interface dos meios puder ser majorada exponencialmente, *i.e.*, se existirem os valores $\delta \in \mathbb{R}$ e $R, N \in \mathbb{N}$ estritamente positivos tais que

$$\mathbb{P}\left(|S_n| > s\right) \leqslant e^{-\delta \cdot |s|}, \qquad \forall\, s > R, n > N. \tag{3.1}$$

Não é possível encontrar tais $\delta$, $R$ e $N$ necessários em (3.1), de forma que o passeio aleatório simétrico simples em $\mathbb{Z}$, além de não ser cotado superiormente (cf. seção 2.4), também não é localizado exponencialmente, já que, pelo Teorema Central do Limite, para qualquer $s$,

$$\mathbb{P}\left(|S_n| > s\right) = \mathbb{P}\left(\frac{|S_n|}{\sqrt{n}} > \frac{s}{\sqrt{n}}\right) \approx 2(1 - \Phi(\frac{s}{\sqrt{n}})) \longrightarrow 1 \tag{3.2}$$

onde $\Phi$ é a distribuição acumulada da Normal$(0, 1)$.

## 3.3 Definições sobre Passeio Aleatório e sobre Potencial

Considere o conjunto $\mathbb{Z}^{\mathbb{Z}}$ de todas as seqüências duplamente infinitas de inteiros e um de seus elementos, a seqüência $a = (\ldots, a_{-2}, a_{-1}, a_0, a_1, a_2, \ldots)$. Define-se o segmento (ou projeção) $a^{(m,n)}$ de $a \in \mathbb{Z}^{\mathbb{Z}}$ entre os pontos $m$ e $n$ de $\mathbb{Z}$ como sendo a $(n - m + 1)$-upla dada por $a^{(m,n)} := (a_m, \ldots, a_n)$.

Para definir rigorosamente o passeio aleatório simples unidimensional que passe pela origem do plano – o ponto $(0, 0)$ – é interessante denotar

- o conjunto $A \subset \mathbb{Z}^{\mathbb{Z}}$ de todas as trajetórias que podem ser descritas por ele, definido por

$$A := \left\{ \mathrm{s} \in \mathbb{Z}^{\mathbb{Z}} : |s_k| \leqslant |k|, |s_k - s_{k-1}| = 1, \forall\, k \in \mathbb{Z} \right\}.$$

- o conjunto $A_{m,n}$ de todos os segmentos $\mathrm{s}^{(m,n)} = (s_m, \ldots, s_n)$ da trajetória s entre os pontos $m, n \in \mathbb{Z}$, definido por

$$A_{m,n} := \left\{ \mathrm{s}^{(m,n)} \in \mathbb{Z}^{\{m,\ldots,n\}} : |s_k| \leqslant |k|, |s_k - s_{k-1}| = 1, \forall\, k \in \{m+1, \ldots, n\} \right\};$$

- a medida de probabilidade $\mathbb{P}$ dada pela medida produto de Bernoulli$(1/2)$
- o passeio aleatório simples simétrico unidimensional S partindo da origem, definido pela seqüência de variáveis aleatórias $\mathrm{S} = (S_n; n \in \mathbb{Z})$ tais que $S_0 = 0$ e a medida $\mathbb{P}$ é a lei da seqüência $(S_{n+1} - S_n; n \in \mathbb{Z})$;
- a seqüência de variáveis aleatórias i.i.d. $\mathrm{Y} = (Y_n; n \in \mathbb{Z})$ independentes de $(S_n; n \in \mathbb{Z})$ e com $\mathbb{P}$ por lei.

Assim, a partir do passeio aleatório definido acima, define-se para cada trecho entre $m$ e $n$ os seguintes objetos matemáticos:

- o potencial $H_{m,n}$ de um trecho $\mathrm{s}^{(m,n)}$ de trajetória do passeio com sendo uma função real $H_{m,n} : A_{m,n} \to \mathbb{R}$;

- o peso $\pi_{m,n}$ de $\mathrm{s}^{(m,n)}$ como sendo

$$\pi_{m,n}(\mathrm{s}^{(m,n)}) := \begin{cases} \mathbb{P}\left(\mathrm{S}^{(m,n)} = \mathrm{s}^{(m,n)}\right) \cdot e^{H_{m,n}(\mathrm{s}^{(m,n)})} & \text{se } \mathrm{s}^{(m,n)} \in A_{m,n} \\ 0 & \text{em caso contrário} \end{cases};$$

- a função de massa de probabilidade $p_{m,n}$ de ocorrer a trajetória $\mathrm{s}^{(m,n)}$ como sendo

$$p_{m,n}(\mathrm{s}^{(m,n)}) := \pi_{m,n}(\mathrm{s}^{(m,n)})/Z^{(m,n)},$$

  onde $Z^{(m,n)} := \sum_{\mathrm{s}^{(m,n)} \in A_{m,n}} \pi_{m,n}(\mathrm{s}^{(m,n)})$ é o fator de normalização da função $\pi_{m,n}$;

- a medida de probabilidade $P_{m,n}$ tal que

$$P_{m,n}\left(\mathrm{S}^{(m,n)} = \mathrm{s}^{(m,n)}\right) = p_{m,n}(\mathrm{s}^{(m,n)}).$$

Note-se que o ação do potencial se dá na forma de reponderação das probabilidades de cada trecho e que, se o potencial $H_{m,n}$ for identicamente nulo, as probabilidades $P_{m,n}$ serão idênticas à medida produto $\mathbb{P}$.

No caso do artigo, a função potencial $H_{m,n}$ é definida em como

$$H_{m,n}(\mathrm{s}^{(m,n)}) = \varepsilon \sum_{k=m}^{n} Y_k \cdot \mathrm{sign}(s_k)$$

onde $\mathrm{sign}(x) = \mathbf{1}_{(0,\infty)}(x) - \mathbf{1}_{(-\infty,0)}(x)$.

Ressalta-se o fato de que, agora, a função potencial $H_{m,n}$ depende também de $\mathbf{Y}^{(m,n)}$, de forma que as famílias de potenciais $(H_{m,n};\ m, n \in \mathbb{Z}, m < n)$, de pesos $(\pi_{m,n};\ m, n \in \mathbb{Z}, m < n)$ e de medida $(P_{m,n}; m, n \in \mathbb{Z}, m < n)$ são variáveis aleatórias, por serem funções de $\mathbf{Y}$. Nesse quadro, o valor $\varepsilon$, que mede a força com a qual os monômeros interagem com o meio, também pode ser interpretado como um parâmetro de perturbação em relação ao passeio aleatório simétrico, já que, caso $\varepsilon$ seja zero, a medida com potencial é a do passeio aleatório simples simétrico.

A cada monômero $S_k$, o modelo associa uma variável $Y_k$, de forma que então contribuirão para a soma de $H_{m,n}$

- ou somando um termo unitário, se forem ambos positivos ou ambos negativos;
- ou subtraindo um termo unitário, se forem um negativo e o outro positivo (ou *vice-versa*);
- ou não contribuirão em nada para $H_{m,n}$.

Assim, pela monotonicidade entre $H_{m,n}$ e $\pi_{m,n}$, quanto mais termos positivos houver no somatório de $H_{m,n}$, maior será a probabilidade $P_{m,n}$.

Assim, [Sinai, 1993] trabalha com as probabilidades dadas por

$$p_{m,n}(\mathrm{s}^{(m,n)}) = \frac{\exp\left\{\varepsilon \sum_{k=m}^{n} Y_k \cdot \operatorname{sign}(s_k)\right\}}{\sum_{\mathbf{r}^{(m,n)} \in A_{m,n}} \exp\left\{\varepsilon \sum_{j=m}^{n} Y_k \cdot \operatorname{sign}(r_j)\right\}}. \tag{3.3}$$

## 3.4 O Efeito do Potencial sobre as Probabilidades do Passeio

Para ilustrar o efeito do potencial sobre o passeio, considere-se que as realizações do passeio aleatório simétrico simples são equiprováveis, de forma que $\mathbb{P}\left(\mathrm{S}^{(0,n)} = \mathrm{s}^{(0,n)}\right) = 2^{-n}$ se $\mathrm{s}^{(0,n)} \in A_{0,n}$.

| Realiz. de | Realizações de $(S_0, S_1, S_2)$ | | | | Prob. |
|---|---|---|---|---|---|
| $(Y_0, Y_1, Y_2)$ | $(0, -1, -2)$ | $(0, -1, 0)$ | $(0, 1, 0)$ | $(0, 1, 2)$ | Total |
| $- - -$ | $0,3015704$ | $0,2728722$ | $0,2234088$ | $0,2021487$ | 1 |
| $- - +$ | $0,2493760$ | $0,2756031$ | $0,2256448$ | $0,2493760$ | 1 |
| $- + -$ | $0,2493760$ | $0,2256448$ | $0,2756031$ | $0,2493760$ | 1 |
| $- + +$ | $0,2021487$ | $0,2234088$ | $0,2728722$ | $0,3015704$ | 1 |
| $+ - -$ | $0,3015704$ | $0,2728722$ | $0,2234088$ | $0,2021487$ | 1 |
| $+ - +$ | $0,2493760$ | $0,2756031$ | $0,2256448$ | $0,2493760$ | 1 |
| $+ + -$ | $0,2493760$ | $0,2256448$ | $0,2756031$ | $0,2493760$ | 1 |
| $+ + +$ | $0,2021487$ | $0,2234088$ | $0,2728722$ | $0,3015704$ | 1 |

Tabela 3.1: Probabilidades do passeio dado o potencial para $\varepsilon = 0,1$ em três passos

Com a introdução de um potencial no passeio em (3.3), tem-se as probabilidades expostas na tabela 3.1, cujas linhas são as probabilidades (calculadas de acordo com (3.3)) de cada realização do passeio condicionados a realização das possíveis combinações de monômeros (hidrófobos representados por '+' e hidrófilos representados por '−').

Além disso, a influência da força $\varepsilon$ da interação dos monômeros com o meio também pode ser ilustrada ao comparar-se a já citada tabela 3.1 relativa à condição $\varepsilon = 0,1$ com a tabela 3.2 referente a $\varepsilon = 0,001$. Mesmo com um $\varepsilon$ mais próximo a zero, os possíveis passeios continuam não-equiprováveis, mas com menor intensidade que no caso $\varepsilon = 0,1$

As tabelas acima foram calculadas através do algoritmo cuja listagem pode ser encontrada no apêndice A.

| Realiz. de | Realizações de $(S_0, S_1, S_2)$ | | | | Prob. |
|---|---|---|---|---|---|
| $(Y_0, Y_1, Y_2)$ | $(0,-1,-2)$ | $(0,-1,0)$ | $(0,1,0)$ | $(0,1,2)$ | Total |
| $- - -$ | $0,2505002$ | $0,2502498$ | $0,2497498$ | $0,2495002$ | 1 |
| $- - +$ | $0,2499999$ | $0,2502501$ | $0,2497501$ | $0,2499999$ | 1 |
| $- + -$ | $0,2499999$ | $0,2497501$ | $0,2502501$ | $0,2499999$ | 1 |
| $- + +$ | $0,2495002$ | $0,2497498$ | $0,2502498$ | $0,2505002$ | 1 |
| $+ - -$ | $0,2505002$ | $0,2502498$ | $0,2497498$ | $0,2495002$ | 1 |
| $+ - +$ | $0,2499999$ | $0,2502501$ | $0,2497501$ | $0,2499999$ | 1 |
| $+ + -$ | $0,2499999$ | $0,2497501$ | $0,2502501$ | $0,2499999$ | 1 |
| $+ + +$ | $0,2495002$ | $0,2497498$ | $0,2502498$ | $0,2505002$ | 1 |

Tabela 3.2: Probabilidades do passeio dado o potencial para $\varepsilon = 0,001$ em três passos

| Realiz. de | Realizações de $(S_0, S_1, S_2)$ | | | | Prob. |
|---|---|---|---|---|---|
| $(Y_0, Y_1, Y_2)$ | $(0,-1,-2)$ | $(0,-1,0)$ | $(0,1,0)$ | $(0,1,2)$ | Total |
| $- - -$ | $0,9236310$ | $0,0758162$ | $0,0005108$ | $0,0000419$ | 1 |
| $- - +$ | $0,0701037$ | $0,8540381$ | $0,0057545$ | $0,0701037$ | 1 |
| $- + -$ | $0,0701037$ | $0,0057545$ | $0,8540381$ | $0,0701037$ | 1 |
| $- + +$ | $0,0000419$ | $0,0005108$ | $0,0758162$ | $0,9236310$ | 1 |
| $+ - -$ | $0,9236310$ | $0,0758162$ | $0,0005108$ | $0,0000419$ | 1 |
| $+ - +$ | $0,0701037$ | $0,8540381$ | $0,0057545$ | $0,0701037$ | 1 |
| $+ + -$ | $0,0701037$ | $0,0057545$ | $0,8540381$ | $0,0701037$ | 1 |
| $+ + +$ | $0,0000419$ | $0,0005108$ | $0,0758162$ | $0,9236310$ | 1 |

Tabela 3.3: Probabilidades do passeio dado o potencial para $\varepsilon = 2,5$ em três passos

## 3.5 O Modelo de Vínculo

Quando [Bolthausen and den Hollander, 1997] e [Biskup and den Hollander, 1999] estudam uma situação mais abrangente, esses resultados são empregados em um modelo ligeiramente modificado, em que a função potencial $H_{m,n}$ é dada por

$$H_{m,n}(\mathrm{s}^{(m,n)}) = \varepsilon \sum_{k=m+1}^{n} Y_k \cdot U(s_k, s_{k-1})$$

onde

$$U(s_k, s_{k-1}) = \begin{cases} \operatorname{sign}(s_k) & \text{se } s_k \neq 0 \\ \operatorname{sign}(s_{k-1}) & \text{se } s_k = 0, \end{cases}$$

ou, equivalentemente, $H_{m,n}$ é dada por

$$H_{m,n}(\mathrm{s}^{(m,n)}) = \varepsilon \sum_{k=m+1}^{n} Y_k \cdot \operatorname{sign}(s_k - s_{k-1}),$$

que associa $Y_k$ com o vínculo que liga $s_{k-1}$ a $s_k$.

Observando com mais detalhe, $s_k - s_{k-1}$ será positivo ou negativo conforme o vínculo entre as posições $k$ e $k+1$ estiver acima ou abaixo, respectivamente, da interface entre os dois meios. Assim, no modelo considerado por esses autores, pode-se interpretar que, ao invés de a atração e repulsão se dar entre os monômeros e os meios, são as *ligações* que são atraídas ou repelidas pelos meios onde se encontram.

Para ilustrar brevemente a diferença entre os modelos, compare-se a tabela 3.1 com a tabela 3.4. Inicialmente, para trechos de $n$ sítios, só pode haver $n-1$ vínculos, de forma que o número das possíveis realizações de potencial é menor que no caso do modelo de sítios.

Portanto, [Bolthausen and den Hollander, 1997] e [Biskup and den Hollander, 1999] consideram um resultado para o modelo de sítio em como sendo válido para um modelo de vínculo, o que não ocorre necessariamente em todos os casos.

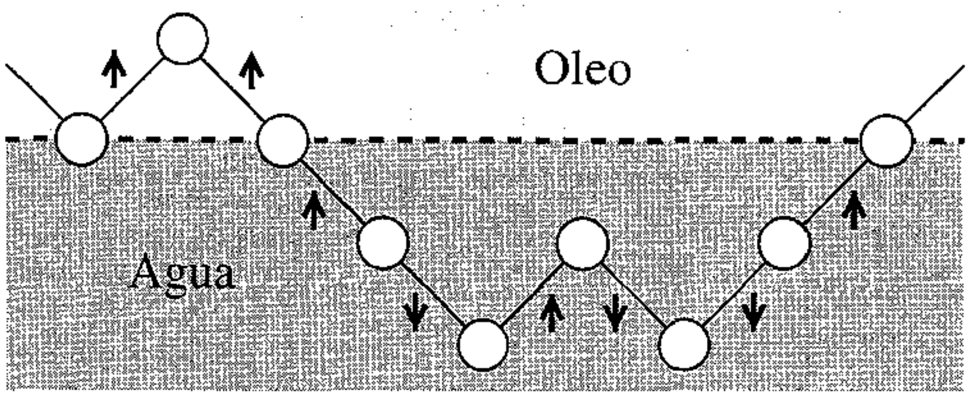


Figura 3.7: Interpretação do modelo vínculo

| Realiz. de $(Y_1, Y_2)$ | Realizações de $(S_0, S_1, S_2)$ $(0, -1, -2)$ | $(0, -1, 0)$ | $(0, 1, 0)$ | $(0, 1, 2)$ | Prob. Total |
|---|---|---|---|---|---|
| $--$ | $0,2993438$ | $0,2993438$ | $0,2006562$ | $0,2006562$ | 1 |
| $-+$ | $0,2500000$ | $0,2500000$ | $0,2500000$ | $0,2500000$ | 1 |
| $+-$ | $0,2500000$ | $0,2500000$ | $0,2500000$ | $0,2500000$ | 1 |
| $++$ | $0,2006562$ | $0,2006562$ | $0,2993438$ | $0,2993438$ | 1 |

Tabela 3.4: Probabilidades do passeio dado o potencial para $\varepsilon = 0,1$ em três passos para o modelo de vínculo

# Capítulo 4

# Localização Exponencial do Passeio Aleatório com Potencial Aleatório de Sítio

O objetivo deste capítulo é estudar explicitando passagens da prova original do Primeiro Teorema apresentado por [Sinai, 1993] e fazer considerações sobre a localização no passeio aleatório simples com um potencial aleatório proposto por [Garel et al., 1989] e estudado pelo autor do artigo.

No artigo, o resultado principal é provado mediante dois Lemas. Aqui, os enunciados dos Teoremas e dos Lemas serão apresentados e as provas do Teorema Principal e seus Lemas serão estudadas em detalhe nas seções subseqüentes.

## 4.1 Resultados

O objetivo do autor é estudar o comportamento assintótico de $S_k$ com o potencial dado pela dupla $(\varepsilon, \mathbf{Y})$. Para o caso determinístico, [Sinai, 1993] cita que [Grossberg et al., 1994] já estudou a situação de afinidade periódica $\mathbf{Y} = (\ldots, +1, -1, y_0 = +1, -1, +1, \ldots)$, o que não será considerado nesse trabalho.

Define-se o operador de translação $T$ agindo sobre o conjunto $\mathbb{Z}^{\mathbb{Z}}$ de todas as seqüências duplamente infinitas definido por $b = Ta$ onde $a, b \in \mathbb{Z}^{\mathbb{Z}}$ são tais que $b_i = a_{i+1}, \forall\, i \in \mathbb{Z}$; denota-se ainda, para $n \in \mathbb{N}$, a sua $n$-ésima iteração $T^n$ definida recursivamente por $T^n a = T(T^{n-1}a)$ e também o operador $T^{-n}$ dado por $b = T^{-n}a$ onde $a, b \in \mathbb{Z}^{\mathbb{Z}}$ são tais que $b_i = a_{i-n}, \forall\, i \in \mathbb{Z}$.

Agora, apresenta-se o resultado:

**Teorema 4.1.** *Existem as variáveis aleatórias $\nu = \nu(\mathbf{Y})$ e $N_0 = N_0(\mathbf{Y})$ e a seqüência de variáveis aleatórias $(\nu_n = \nu_n(\mathbf{Y}^{(0,n)}); n \in \mathbb{N})$ assumindo valores em $\mathbb{N}$ e tais que, para quase todo $\mathbf{Y}$,*

- *a variável $N_0$ é finita;*
- $\nu_n(\mathbf{Y}^{(0,n)}) = \nu(T^n\mathbf{Y}), \forall\, n \geqslant N_0$; *e*
- $P_{0,n}\,(S_n = s) \leqslant$ *const* $\cdot \exp(-\delta \cdot |s|)$, *se* $|s| \geqslant \nu_n, \forall\, n \geqslant N_0$, *onde const é constante positiva e $\delta = \delta(\varepsilon)$ é função afim do parâmetro $\varepsilon$ de perturbação.*

## 4.2 Comentários

Há duas considerações importantes a serem feitas:

- sob essa nova medida, o passeio, que anteriormente era não localizado, passa agora a ser localizado exponencialmente
- essa nova medida de probabilidade tem comportamento completamente diverso do da medida produto empregada para o passeio sem o potencial;

desenvolvidos nas subseções a seguir.

Interpretando o Teorema 4.1, vê-se que, pela terceira propriedade, $\nu(\mathbf{Y})$ pode ser interpretada como um raio de localização do passeio quando esse se encontrar em condição de equilíbrio, pois, para $n > N_0$ e $m \in \mathbb{N}$, todas as probabilidades $P_{0,n}\left(|S_n| > \nu_n(\mathbf{Y}) + m\right)$ de que a partícula esteja $m$ unidades além desse raio decairão com velocidade exponencial.

Na última seção do capítulo anterior, já havia sido adiantado que a introdução de um potencial modificava as probabilidades das trajetórias possíveis. Agora, ressalta-se outro aspecto da alteração do comportamento do passeio aleatório.

### 4.2.1 Comportamento da $P_{m,n}$

A conseqüência da introdução do potencial (determinístico ou aleatório) é a impossibilidade de se construir a medida de probabilidade do processo a partir de uma medida produto, como era o caso antes da introdução do potencial.

| $P_1(0,-1)$ | $P_1(0,1)$ | $Y_0\,Y_1\,Y_2$ | $P_2(0,-1)$ | $P_2(0,1)$ |
|---|---|---|---|---|
| 0,549834 | 0,450166 | $---$ | 0,5744426 | 0,4255575 |
| | | $--+$ | 0,5249791 | 0,4750208 |
| 0,450166 | 0,549834 | $-+-$ | 0,4750208 | 0,5249791 |
| | | $-++$ | 0,4255575 | 0,5744426 |
| 0,549834 | 0,450166 | $+--$ | 0,5744426 | 0,4255575 |
| | | $+-+$ | 0,5249791 | 0,4750208 |
| 0,450166 | 0,549834 | $++-$ | 0,4750208 | 0,5249791 |
| | | $+++$ | 0,4255575 | 0,5744426 |

Tabela 4.1: Comparação das probabilidades do passeio com os potenciais em dois passos e em três passos para $\varepsilon = 0,1$

Isso pode ser ilustrado ao considerar-se o novo comportamento da medida de probabilidade do passeio aleatório, como será visto a seguir.

No passeio sem potencial, a probabilidade de um trecho $\mathrm{s}^{(m,n)}$ é a mesma se medido considerando seus passos entre $m$ e $n$ ou se forem considerados (através do Teorema das Probabilidades Totais) todos os valores passíveis se serem seus passos entre $m' < m$ e $n' > n$.

Já no passeio com potencial, um trecho $\mathrm{s}^{(m,n)}$ recebe um valor de $P_{m,n}$ e outro valor distinto de $P_{m',n'}$, como pode ser visto ao considerar, $P_{0,1}(S_0 = 0, S_1 = 1) \neq P_{0,2}(S_0 = 0, S_1 = 1)$, já que $P_{0,1}(S_0 = 0, S_1 = 1) = P_{0,1}(\mathrm{S}^{(0,1)} = (0,1)) \neq P_{0,2}(\mathrm{S}^{(0,2)} = (0,1,2)) + P_{0,2}(\mathrm{S}^{(0,2)} = (0,1,0)) = P_{0,2}(S_0 = 0, S_1 = 1) = P_{0,2}(\mathrm{S}^{(0,1)} = (0,1))$, conforme consta na tabela 4.1.

No lado esquerdo da tabela 4.1, estão os valores de $P_{0,1}$ calculados diretamente através de (3.3) para $m = 0$ e $n = 1$. Em seu lado direito, estão os valores de $P_{0,2}$ calculados através de (3.3) para $m = 0$ e $n = 2$ e somados em relação a $S_2$. Como conseqüência, a probabilidade de $s^{(0,1)}$ medida através de $P_{0,2}$ depende de $Y_2$, ao passo que $P_{0,1}$ independe dele.

Isso passa a fazer sentido se isso for interpretado como a falta de informação a respeito da afinidade do próximo monômero com o meio onde o trecho já se encontra.

Considere a situação do passeio $s^{(0,8)}$ da parte inferior da figura 3.6. Se só se soubesse a afinidade do primeiro até o penúltimo passos e se a afinidade do último passo não fosse considerada (o que corresponde a conhecer o trecho $\mathbf{Y}^{(0,7)}$), então seria possível esperar que esse fosse hidrófilo ou hidrófobo com a mesma chance, então tanto se $S_8 = S_7 - 1$ ou se $S_8 = S_7 + 1$, há a mesma chance de $s^{(0,8)}$ de estar mais ou menos adaptado ao meio. Contudo se for sabido que o $Y_8 = +1$ (*i.e.*, que $S_8$ é hidrófobo), então quer $S_8 = S_7 - 1$, quer $S_8 = S_7 + 1$, o trecho terá menor afinidade com o meio, pois $S_8$ continuará imerso em água. A situação é idêntica quando se sabe que $S_8$ é hidrófilo, pois $S_8$ já estará imerso em água do mesmo jeito, tendo maior afinidade com o meio independente do conhecimento de seu valor

É importante ressaltar que a probabilidade $P_{m,n}$ expressa em (3.3) *não* é a probabilidade de se formar o trecho de polímero (finito) $s^{(m,n)}$ de comprimento $m - n + 1$. Essa probabilidade serve para medir a força que o meio exerce *nesse trecho finito* para evitar ou incentivar que um polímero de comprimento infinito que contenha esse segmento ocorrendo nessa posição quando o meio é dado localmente por $\mathbf{Y}^{(m,n)}$.

## 4.3 Prova do Teorema 4.1

Os dois primeiros tópicos enunciados no Teorema Principal são provados no Lema 4.4 (que, por sua vez, depende de dos Lemas 4.2 e 4.3), de forma que a prova do Teorema Principal pode ser resumida a encontrar um majorante para a probabilidade $P_{0,n}(S_n = s)$, expressa no terceiro tópico.

Expandindo $P_{0,n}$, tem-se, para $n \in \mathbb{N}$ e $s \in \mathbb{Z}$ tais que $n+s$ seja par e $|s| \leqslant n$

$$\begin{aligned} P_{0,n}(S_n = s) &= \frac{1}{Z^{(0,n)}} \sum_{\mathrm{s}^{(0,n)} \in B_{0,n}^{0,s}} \pi_n(\mathrm{s}^{(0,n)}) \\ &= \frac{1}{Z^{(0,n)}} \sum_{t=0}^{n-|s|} \left( \sum_{\mathrm{s}^{(0,n)} \in E_{0,t,n}^{s}} \pi_n(\mathrm{s}^{(0,n)}) \right) \\ &=: \frac{1}{Z^{(0,n)}} \sum_{t=0}^{n-|s|} Z_{0,t,n}^{s}, \end{aligned} \tag{4.1}$$

onde

- $B_{m,n}^{a,b}$ é o conjunto das trajetórias que partiram de $a$ no instante $m$ e chegaram a $b$ no instante $n$, dado por $B_{m,n}^{a,b} := \{\mathrm{s}^{(m,n)} \in A_{m,n} : s_m = a, s_n = b\}$;
- $E_{m,k,n}^{a}$ é o conjunto das trajetórias que partiram da interface no instante $m$, retornaram à interface no instante $k$ e chegaram a $a$ no instante $n$ sem tocar a interface entre $k+1$ e $n-1$, dado por $E_{m,k,n}^{a} := \{\mathrm{s}^{(m,n)} \in B_{m,n}^{0,a} : s_{m+1} \cdot \ldots \cdot {}_{n-1} \neq 0\}$ (note-se que $B_{m,n}^{0,a}$ é igual à união disjunta $\cup_{k=m}^{n} E_{m,k,n}^{a}$);
- $Z_{0,t,n}^{s}$ é, portanto, a soma dos pesos das trajetórias que partiram da origem e chegaram a $s$ no instante $n$ tendo passado pela interface pela última vez no instante $t$, conforme a figura 4.1.

Assim, objetiva-se expressar essa probabilidade na forma de uma fração conveniente, cujos denominador e numerador serão minorado e majorado respectivamente a seguir.

Considere o denominador de (4.1). Para $n$ e $s$ pares e $t \in \{0, 2, 4, \ldots, n-|s|\}$, tem-se

$$Z^{(0,n)} = \sum_{\mathrm{s}^{(0,n)} \in A_{0,n}} \pi_n(\mathrm{s}^{(0,n)}) \geqslant \sum_{\mathrm{s}^{(0,n)} \in B_{0,t,n}^{0,0,0}} \pi_n(\mathrm{s}^{(0,n)}), \tag{4.2}$$

já que $A_{0,n} \supset B_{0,t,n}^{0,0,0}$, onde $B_{m_1,\ldots,m_k}^{a_1,\ldots,a_k} := \{\mathrm{s}^{(m_1,m_k)} \in A_{m_1,m_k} : s_{m_1} = a_1, \ldots, s_{m_k} = a_k\}$ (generalizando, assim, a definição de $B_{m,n}^{a,b}$).

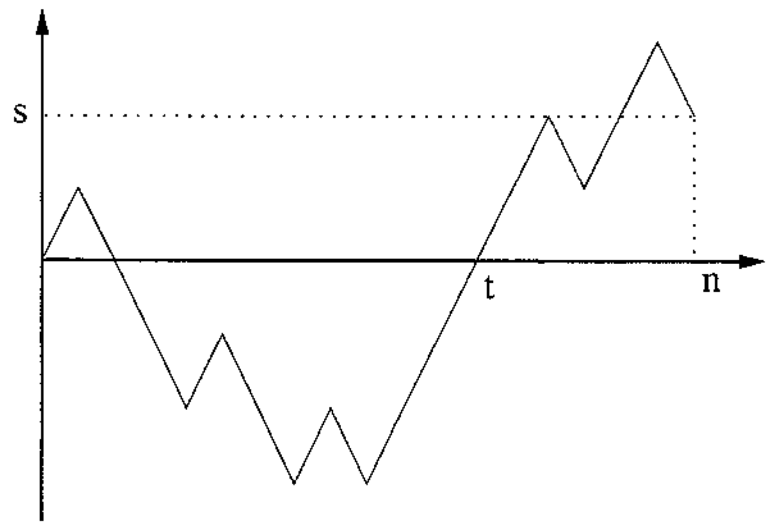


Figura 4.1: Trecho de uma trajetória $s^{(0,n)} \in E_{0,t,n}$ cujo peso $\pi_{0,n}$ contribui para $Z_{0,t,n}$.

Como o conjunto $B^{0,\dots,0}_{m_1,\dots,m_k}$ pode ser visto como o produto cartesiano

$$\bigotimes_{i=2}^{k} B^{0,0}_{m_{i-1},m_i} := B^{0,0}_{m_1,m_2} \times B^{0,0}_{m_2,m_3} \times \cdots \times B^{0,0}_{m_{k-1},m_k}, \tag{4.3}$$

então a expressão anterior se reduz a

$$\begin{aligned} Z^{(0,n)} &\geqslant \sum_{s^{(0,n)} \in B^{0,0}_{0,t} \times B^{0,0}_{t,n}} 2^{-n} \exp\left\{ \varepsilon \sum_{k=0}^{t} Y_k \cdot \operatorname{sign}(s_k) + \varepsilon \sum_{j=t}^{n} Y_j \cdot \operatorname{sign}(s_j) \right\} \\ &= \sum_{s^{(0,t)} \in B^{0,0}_{0,t}} \sum_{s^{(t,n)} \in B^{0,0}_{t,n}} \pi_{0,t}(s^{(0,t)}) \cdot \pi_{t,n}(s^{(t,n)}) \\ &= \left( \sum_{s^{(0,t)} \in B^{0,0}_{0,t}} \pi_{0,t}(s^{(0,t)}) \right) \cdot \left( \sum_{s^{(t,n)} \in B^{0,0}_{t,n}} \pi_{t,n}(s^{(t,n)}) \right) \quad =: Z_0^{(0,t)} \cdot Z_0^{(t,n)} \\ \therefore\ Z^{(0,n)} &\geqslant Z_0^{(0,t)} \cdot Z_0^{(t,n)}, \end{aligned} \tag{4.4}$$

onde $Z_0^{(m,n)}$ é a soma dos pesos das pontes entre $m$ e $n$ (*i.e.*, das trajetórias que partiram da interface no instante $m$ e a ela regressaram no instante $n$), conforme a figura 4.2.

Da mesma forma, o domínio $E^s_{0,t,n}$ da soma de $Z^s_{0,t,n}$ no numerador de (4.1) também

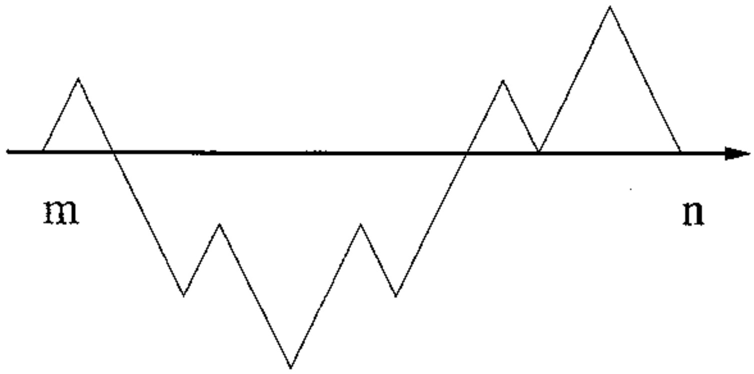


Figura 4.2: Uma ponte $s^{(m,n)} \in B^{0,0}_{m,n}$ cujo peso $\pi_{m,n}$ contribui para $Z_0^{(m,n)}$.

pode ser visto como o produto cartesiano $B^{0,0}_{0,t} \times E^s_{t,t,n}$ e, assim

$$\begin{aligned}
Z^s_{0,t,n} &= \sum_{s^{(0,n)} \in B^{0,0}_{0,t} \times E^s_{t,t,n}} 2^{-n} \exp\left\{ \varepsilon \sum_{k=0}^{t} Y_k \cdot \operatorname{sign}(s_k) + \varepsilon \sum_{j=t}^{n} Y_j \cdot \operatorname{sign}(s_j) \right\} \\
&= \sum_{s^{(0,t)} \in B^{0,0}_{0,t}} \sum_{s^{(t,n)} \in E^s_{t,t,n}} \pi_{0,t}(s^{(0,t)}) \cdot \pi_{t,n}(s^{(t,n)}) \\
&= \sum_{s^{(0,t)} \in B^{0,0}_{0,t}} \pi_{0,t}(s^{(0,t)}) \cdot \sum_{s^{(t,n)} \in E^s_{t,t,n}} \pi_{t,n}(s^{(t,n)}) \\
&=: Z_0^{(0,t)} \cdot Z^s_{t,n} \qquad (4.5)
\end{aligned}$$

onde $Z^s_{t,n}$ é a soma dos pesos dos trecho que partiram da interface no instante $t$ e chegaram $s$ no instante $n$ sem terem voltado à interface.

Aplicando (4.4) e (4.5) em (4.1), obtém-se a cota superior

$$P_{0,n}(S_n = s) \leqslant \sum_{t=0}^{n-|s|} Z^s_{t,n} / Z_0^{(t,n)}. \qquad (4.6)$$

Não será possível desenvolver a majoração de (4.6) para todos valores de $n$ e $s$. Assim, o autor procura os valores a partir dos quais essa majoração passa a ser possível.

Cabe, aqui, apresentar o enunciado dos Lemas que serão utilizados para estabelecer esses valores de $n$ e $s$, cujas provas estão nas próximas seções.

**Lema 4.2.** *Para quase todo* $\mathbf{Y}$, *que existe* $m'(\mathbf{Y})$ *tal que*

$$\Big|Y_{-m} + \cdots + Y_{-1}\Big| \leqslant m^{2/3}, \forall\, m \geqslant m'(\mathbf{Y}). \tag{4.7}$$

**Lema 4.3.** *Existem* $\delta_1(\varepsilon) > 0$ *e* $m''(\mathbf{Y}) > 0$ *tais que*

$$Z_0^{(-m,0)}(\mathbf{Y}) \geqslant \exp(\delta_1(\varepsilon) \cdot m), \forall\, m > m''(\mathbf{Y})$$

Considerando os Lemas 4.2 e 4.3, tem-se que $\nu = \nu(\mathbf{Y}) := m'(\mathbf{Y}) \vee m''(\mathbf{Y})$ é o menor inteiro a partir do qual $|Y_{-m} + \cdots + Y_{-1}| \leqslant m^{2/3}$ e $Z_0^{(-m,0)} \geqslant \exp(\delta_1 \cdot m)$ para todo $m \geqslant \nu$.

Em seguida, o autor define os análogos de $m'$ e $m''$ para o intervalo entre 0 e $n$. Seja $m'_n$ o menor inteiro $m < n$ tal que

$$|Y_{n-k} + \ldots + Y_{n-1} + Y_n| \leqslant k^{2/3}, \forall\, k \in \{m, \ldots, n\}. \tag{4.8}$$

Caso tal $m$ não exista, $m'_n := n$. Formalmente, seja $F(n, \mathbf{Y})$ o conjunto de todos os inteiros $m$ que atendem à condição (4.8), dado por

$$F(n, \mathbf{Y}) := \big\{m \in \{0, \ldots, n-1\} : \, |Y_{n-k} + \ldots + Y_{n-1} + Y_n| \leqslant k^{2/3}, \forall\, k \in \{m, \ldots, n\}\big\}.$$

Então define-se

$$m'_n = m'_n(\mathbf{Y}) := \begin{cases} \min F(n, \mathbf{Y}) & \text{se } F(n, \mathbf{Y}) \neq \varnothing \\ n & \text{em caso contrário.} \end{cases}$$

Da mesma forma, seja $m''_n = m''_n(\mathbf{Y})$ o menor inteiro $m < n$ tal que $Z_0^{(n-k,n)} \geqslant \exp(-\delta_1 \cdot k), \forall\, k \in \{m, \ldots, n\}$ para o $\delta_1$ relativo a $m''(\mathbf{Y})$ conforme o Lema 4.3 ou então $m''_n := n$ caso tal $m$ não exista. Por fim, seja $\nu_n = \nu_n(\mathbf{Y}) := m'_n \vee m''_n$.

Assim, $\nu_n$ ou é igual a $n$ ou é o menor inteiro que assegura simultaneamente que, para todo $k$ a partir dele até $n$, $|Y_{n-k} + \ldots + Y_{n-1} + Y_n| \leqslant k^{2/3}$ e $Z_0^{(n-k,n)} \geqslant \exp(-\delta_1 \cdot k)$.

O último Lema empregado segue:

**Lema 4.4.** *Para quase todo* $\mathbf{Y}$*, existe* $N_0(\mathbf{Y}) \in \mathbb{N}$ *tal que* $\nu_n(\mathbf{Y}) = \nu(T^n\mathbf{Y}), \forall\, n \geqslant N_0$.

Como, pelo Lema 4.4, existe $N_0$ a partir do qual $\nu_n(\mathbf{Y}) = \nu(T^n\mathbf{Y})$, então para $n \geqslant N_0$ e para $(n-t) \geqslant \nu(T^n\mathbf{Y}) = \nu_n(\mathbf{Y})$, uma cota superior para $Z^s_{t,n}$ pode ser obtida simultaneamente a uma cota inferior para $Z_0^{(t,n)}$.

Assim, doravante, assume-se que $n \geqslant N_0$ e $|s| \geqslant \nu(T^n\mathbf{Y})$, já que $n - t \geqslant |s|$.

Continuando o desenvolvimento de $Z^s_{t,n}$, tem-se que

$$\begin{aligned}
Z^s_{t,n} &= \sum_{\mathbf{s}^{(t,n)} \in E^s_{t,t,n}} 2^{-(n-t)} \exp\left\{\varepsilon \cdot \operatorname{sign}(s) \sum_{j=t+1}^{n} Y_j\right\} \\
&= \exp\left\{\varepsilon \cdot \operatorname{sign}(s) \sum_{j=t+1}^{n} Y_j\right\} \cdot \sum_{\mathbf{s}^{(t,n)} \in E^s_{t,t,n}} 2^{-(n-t)} \\
&= \exp\left\{\varepsilon \cdot \operatorname{sign}(s) \sum_{j=t+1}^{n} Y_j\right\} \cdot \mathbb{P}\left(S_{t+1} \cdot \ldots \cdot S_{n-1} \neq 0, S_n = s\right), \\
&\leqslant \exp\left\{\varepsilon \cdot \operatorname{sign}(s) \sum_{j=t+1}^{n} Y_j\right\},
\end{aligned}$$

que, conforme o Lema 4.2, resulta em

$$\leqslant \exp\left\{\varepsilon \cdot \operatorname{sign}(s) \cdot (n-t)^{2/3}\right\}$$

logo

$$Z^s_{t,n} \leqslant \exp\left\{\varepsilon \cdot (n-t)^{2/3}\right\}. \tag{4.9}$$

Aplicando (4.9) a (4.6) e levando em consideração o Lema 4.3, tem-se que

$$\begin{aligned}
P_{0,n}(S_n = s) &\leqslant \sum_{t=0}^{n-|s|} Z_{t,n}^{s} / Z_0^{(t,n)} \\
&\leqslant \sum_{t=0}^{n-|s|} \exp\left\{\varepsilon \cdot (n-t)^{2/3} - \frac{1}{2}\log(n-t) - \delta_1(\varepsilon)\cdot(n-t)\right\} \\
&\leqslant \sum_{m=|s|}^{n} \exp\left\{\varepsilon \cdot m^{2/3} - \delta_1(\varepsilon)\cdot m\right\}. \qquad (4.10)
\end{aligned}$$

Considere $m_0$ fixo e com valor a ser escolhido convenientemente.

Então, tem-se que, para todo $m \geqslant m_0$,

$$m^{2/3} \leqslant \frac{m_0^{2/3}}{m_0} \cdot m = m_0^{-1/3} \cdot m$$

$$-\delta_1(\varepsilon)\cdot m + \varepsilon\, m^{2/3} \leqslant -\left(\delta_1(\varepsilon) - \varepsilon\, m_0^{-1/3}\right)\cdot m =: -\delta(\varepsilon)\cdot m.$$

Para que $\delta(\varepsilon) > \alpha > 0$, é necessário e suficiente que

$$m_0 > \left(\frac{\varepsilon}{\delta_1(\varepsilon) - \alpha}\right)^3. \qquad (4.11)$$

Assim, aplicando (4.11) em (4.10), tem-se que

$$P_{0,n}(S_n = s) \leqslant \sum_{m=|s|}^{n} \exp\left\{-\delta(\varepsilon)\cdot m\right\}$$

que, se for considerado $\eta = \exp\{-\delta(\varepsilon)\}$, pode ser visto como

$$\begin{aligned}
&= \sum_{m=|s|}^{n} \eta^m = \frac{1-\eta^{n+1}}{1-\eta} - \frac{1-\eta^{|s|}}{1-\eta} \\
&\leqslant \frac{\eta^{|s|}}{1-\eta} = \frac{\exp\{-\delta(\varepsilon)\cdot|s|\}}{1-\exp\{-\delta(\varepsilon)\}} \leqslant \text{const}\cdot\exp\{-\delta(\varepsilon)\cdot|s|\} \qquad (4.12)
\end{aligned}$$

### 4.3.1 Prova do Lema 4.2

Para ter a confirmação desse fato, considere que o limite

$$\lim_{n\to\infty} \frac{c\sqrt{2n\log\log n}}{n^{2/3}} = 0$$

para todo $c > 1$ garante, através de (2.3), que tanto

$$\left[\sum_{k=0}^{n} Y_k \geqslant n^{2/3}\right] \subset \left[\sum_{k=0}^{n} Y_k \geqslant c\sqrt{2n\log\log n}\right]$$

como

$$\left[\sum_{k=0}^{n} Y_k \leqslant -n^{2/3}\right] \subset \left[\sum_{k=0}^{n} Y_k \leqslant -c\sqrt{2n\log\log n}\right]$$

quase certamente ocorrem apenas um número finito de vezes, idem para sua união

$$\left[\left|\sum_{k=0}^{n} Y_k\right| \geqslant n^{2/3}\right].$$

Como a seqüência $(Y_i; i = 1, 2, \dots)$ não se difere probabilisticamente da seqüência $(Y_i; i = -1, -2, \dots)$, então o resultado também é válido para essa última.

### 4.3.2 Prova do Lema 4.3

Considere $m$ múltiplo de um número par $\Delta = \Delta(\varepsilon) \in \mathbb{N}$ fixo (cujo valor conveniente será escolhido mais a diante), i.e., $m = r\Delta$ para algum $r$. Nesse caso, tem-se

$$Z_0^{(-m,0)}(\mathrm{Y}) = \sum_{\mathrm{s}^{(-m,0)} \in B^{0,0}_{-m,0}} \pi_{m,n}(\mathrm{s}^{(-m,0)})$$

que, da mesma forma que em (4.2), pode ser minorado por

$$\geqslant \sum_{\mathrm{s}^{(-r\Delta,0)}\in B^{0,0,\dots,0}_{-r\Delta,\dots,-(r-1)\Delta,\dots,0}} 2^{-m}\exp\left\{\varepsilon\sum_{k=-r\Delta}^{0} Y_k\cdot \mathrm{sign}(s_k)\right\}$$

cujo domínio da soma pode ser fatorado através de (4.3), como em (4.4),

$$\begin{aligned}
&= \sum_{\mathrm{s}^{(-r\Delta,0)}\in\bigotimes_{j=1}^{r} B^{0,0}_{-j\Delta,-(j-1)\Delta}} 2^{-r\Delta}\exp\left\{\varepsilon\sum_{j=1}^{r}\sum_{k=-j\Delta+1}^{-(j-1)\Delta-1} Y_k\cdot\mathrm{sign}(s_k)\right\}\\
&= \sum_{\substack{\mathrm{s}^{(-r\Delta,-(r-1)\Delta)}\\ \in B^{0,0}_{-r\Delta,-(r-1)\Delta}}}\cdots\sum_{\mathrm{s}^{(-\Delta,0)}\in B^{0,0}_{-\Delta,0}}\prod_{j=1}^{r}2^{-\Delta}\exp\left\{\varepsilon\sum_{k=-j\Delta+1}^{-(j-1)\Delta-1} Y_k\cdot\mathrm{sign}(s_k)\right\}\\
&= \prod_{j=1}^{r}\sum_{\mathrm{s}^{(-j\Delta,-(j-1)\Delta)}\in B^{0,0}_{-j\Delta,-(j-1)\Delta}}\pi_{-j\Delta,-(j-1)\Delta}(\mathrm{s}^{(-j\Delta,-(j-1)\Delta)})\\
&= \prod_{j=1}^{r} Z_0^{(-j\Delta,-(j-1)\Delta)}
\end{aligned}$$

que pode ser minorado por

$$\geqslant \prod_{j=1}^{r}\left(\sum_{\mathrm{s}^{(-j\Delta,-(j-1)\Delta)}\in C_{-j\Delta,-(j-1)\Delta}}\pi_{-j\Delta,-(j-1)\Delta}(\mathrm{s}^{(-j\Delta,-(j-1)\Delta)})\right),$$

onde $C_{m,n} := \left\{\mathrm{s}^{(m,n)}\in B^{0,0}_{m,n} : s_{m+1}\cdot\ldots\cdot s_{n-1}\neq 0\right\}$ é o conjunto das pontes entre $m$ e $n$ que não tocam a interface entre esses instantes, permitindo definir

$$=: \prod_{j=1}^{r} Z_{00}^{(-j\Delta,-(j-1)\Delta)},$$

de forma que

$$Z_0^{(-m,0)} \geqslant \prod_{j=1}^{r} Z_{00}^{(-j\Delta,-(j-1)\Delta)} \tag{4.13}$$

O conjunto $C_{m,n}$ das pontes que não tocam a interface pode ser particionado nos conjuntos $C^{+}_{m,n}$ e $C^{-}_{m,n}$ das pontes que ficam respectivamente acima e abaixo da interface, definidos por

$$C_{m,n}^{+} := \left\{ \mathrm{s}^{(m,n)} \in C_{m,n} : s_{m+1} > 0 \right\}$$
$$C_{m,n}^{-} := \left\{ \mathrm{s}^{(m,n)} \in C_{m,n} : s_{m+1} < 0 \right\},$$

de forma que

$$\operatorname{sign}(s_{m+1}) = \cdots = \operatorname{sign}(s_{n-1}) = \begin{cases} +1 & \text{para } \mathrm{s}^{(m,n)} \in C_{m,n} \\ -1 & \text{para } \mathrm{s}^{(m,n)} \in C_{m,n}. \end{cases}$$

Se se define, por comodidade de notação,

$$\Sigma_{j,\Delta}\mathbf{Y} := \sum_{k=-j\Delta+1}^{-(j-1)\Delta-1} Y_k.$$

então

$$\begin{aligned}
Z_{00}^{(-j\Delta,-(j-1)\Delta)} &= \sum_{\mathrm{s}^{(-j\Delta,-(j-1)\Delta)} \in C_{-j\Delta,-(j-1)\Delta}} 2^{-\Delta} \exp\left\{\varepsilon \cdot \operatorname{sign}(s_{-j\Delta+1}) \cdot \Sigma_{j,\Delta}\mathbf{Y}\right\} \\
&= \exp\left\{\varepsilon \cdot \Sigma_{j,\Delta}\mathbf{Y}\right\} \cdot \left( \sum_{\mathrm{s}^{(-j\Delta,-(j-1)\Delta)} \in C^{+}_{-j\Delta,-(j-1)\Delta}} 2^{-\Delta} \right) \\
&\quad + \exp\left\{-\varepsilon \cdot \Sigma_{j,\Delta}\mathbf{Y}\right\} \cdot \left( \sum_{\mathrm{s}^{(-j\Delta,-(j-1)\Delta)} \in C^{-}_{-j\Delta,-(j-1)\Delta}} 2^{-\Delta} \right) \\
&= \left(\exp\left\{\varepsilon \cdot \Sigma_{j,\Delta}\mathbf{Y}\right\} + \exp\left\{-\varepsilon \cdot \Sigma_{j,\Delta}\mathbf{Y}\right\}\right) \cdot q(\Delta) \\
&= \left(\exp\left\{\varepsilon \cdot |\Sigma_{j,\Delta}\mathbf{Y}|\right\} + \exp\left\{-\varepsilon \cdot |\Sigma_{j,\Delta}\mathbf{Y}|\right\}\right) \cdot q(\Delta) \\
&= \exp\left\{\varepsilon \cdot |\Sigma_{j,\Delta}\mathbf{Y}|\right\} \cdot \left(1 + \exp \cdot \left\{-2\varepsilon \cdot |\Sigma_{j,\Delta}\mathbf{Y}|\right\}\right) \cdot q(\Delta),
\end{aligned}$$

onde $q(\Delta) := \mathbb{P}\left(S_1 \cdot \ldots \cdot S_{\Delta-1} > 0, S_\Delta = 0\right)$.

Assim,

$$\log\left\{Z_{00}^{(-j\Delta,-(j-1)\Delta)}\right\} = \varepsilon \cdot |\Sigma_{j,\Delta}\mathbf{Y}| + \log\left\{1 + \exp\left\{-2\varepsilon|\Sigma_{j,\Delta}\mathbf{Y}|\right\}\right\} + \log(q(\Delta)) \quad (4.14)$$

cujos dois primeiros termos são aleatórios e o último termo é uma probabilidade.

Assim, define-se a quantidade $\delta_2(\varepsilon, \Delta)$ por

$$\delta_2(\varepsilon, \Delta) := \varepsilon \cdot \mathbb{E}\left(|\Sigma_{j,\Delta}\mathbf{Y}|\right) + \log(q(\Delta)) = \varepsilon \cdot \mathbb{E}\left(|\mathrm{S}_{\Delta-1}|\right) + \log(q(\Delta)).$$

Ora, segundo (2.2), tem-se $q(\Delta) = O(\Delta^{-3/2})$ e, por conseqüência, $\log(q(\Delta)) = -O(\log(\Delta))$ pela continuidade de log e, conforme (2.1) e o Teorema 2.3,

$$\mathbb{E}\left(|\Sigma_{j,\Delta}\mathbf{Y}|\right) = \mathbb{E}\left(|S_{\Delta-1}|\right) = (\Delta - 1) \cdot \mathbb{P}\left(S_{\Delta-2} = 0\right) = O(\Delta^{1/2}),$$

o que permite dizer que

$$\delta_2(\varepsilon, \Delta) = \varepsilon \cdot O(\Delta^{1/2}) - O(\log \Delta)$$

e, por ser função monótona não-decrescente de $\Delta$, $\delta_2(\varepsilon, \Delta)$ passa a ser estritamente positiva a partir de algum $\Delta_0 = \Delta_0(\varepsilon)$ grande o suficiente, donde pode-se escolher (e fixar) um valor de $\Delta$ maior que ou igual a $\Delta_0$ e considerar $\delta_2(\varepsilon) := \delta_2(\varepsilon, \Delta)$ para esse $\Delta$ escolhido.

Ao levar-se (4.13) em conta, tem-se que

$$\begin{aligned}
\frac{\Delta}{m}\log(Z_0^{(-m,0)}) - \delta_2(\varepsilon) &\geqslant \frac{\Delta}{m}\log\left(\prod_{j=1}^{r} Z_{00}^{(-j\Delta,-(j-1)\Delta)}\right) - \delta_2(\varepsilon) \\
&= \frac{1}{r}\sum_{j=1}^{r}\left\{\log\left(Z_{00}^{(-j\Delta,-(j-1)\Delta)}\right) - \delta_2(\varepsilon)\right\} \\
&= \varepsilon \cdot \left(\frac{1}{r}\sum_{j=1}^{r}|\Sigma_{j,\Delta}\mathbf{Y}| - \mathbb{E}\left(|\Sigma_{j,\Delta}\mathbf{Y}|\right)\right) \\
&\quad + \frac{1}{r}\sum_{j=1}^{r}\log\left\{1 + \exp\left\{-2\varepsilon|\Sigma_{j,\Delta}\mathbf{Y}|\right\}\right\}.
\end{aligned} \tag{4.15}$$

Ora, as variáveis aleatórias $\Sigma_{j,\Delta}\mathbf{Y}$ formam uma seqüência i.i.d. para $j = 1, ..., r$ (já que são funções de conjuntos disjuntos de variáveis que são, por sua vez, independentes entre si) e têm com esperança finita, o que permite a aplicação da Lei Forte dos Grandes Números

$$\frac{1}{r}\sum_{j=1}^{r}|\Sigma_{j,\Delta}\mathbf{Y}| \xrightarrow{qc} \mathbb{E}\left(|\Sigma_{j,\Delta}\mathbf{Y}|\right). \tag{4.16}$$

Quanto ao último termo de (4.15), pelo Teorema Ergódico de Birkhoff para

$$f(\mathbf{Y}) = \log\left(1+\exp\left(-2\varepsilon\left|\sum_{k=-\Delta+1}^{-1} Y_k\right|\right)\right)$$

e para o operador de translação $T^{\Delta}$, o limite

$$\lim_{r\longrightarrow\infty}\frac{1}{r}\sum_{j=1}^{r}\log\left\{1+\exp\left\{-2\varepsilon|\Sigma_{j,\Delta}\mathbf{Y}|\right\}\right\} \tag{4.17}$$

existe e é variável aleatória não-negativa para quase todo $\mathbf{Y}$.

Portanto, aplicando-se (4.17) e (4.16) em (4.15), tem-se que, para quase todo $\mathbf{Y}$ existe um $m''$ grande o suficiente tal que, para todo $m \geqslant m''$

$$\frac{\Delta}{m}\log(Z_0^{(-m,0)}(\mathbf{Y})) - \delta_2(\varepsilon) \geqslant \frac{\Delta}{m}\log\left(\prod_{j=1}^{r} Z_{00}^{(-j\Delta,-(j-1)\Delta)}\right) - \delta_2(\varepsilon) \geqslant 0 \Rightarrow$$
$$\Rightarrow \log(Z_0^{(-m,0)}(\mathbf{Y})) \geqslant \frac{\delta_2(\varepsilon)}{\Delta}\cdot m \Rightarrow Z_0^{(-m,0)}(\mathbf{Y}) \geqslant \exp\left\{\delta_1(\varepsilon)\cdot m\right\},$$

donde $\delta_1$ função afim de $\varepsilon$ com coeficiente linear positivo.

### 4.3.3 Prova do Lema 4.4

Pela invariância por translação de $\mathbb{P}$, $\mathbf{Y}$ e $T^n\mathbf{Y}$ têm a mesma distribuição, de forma que o mesmo ocorre com $m'(\mathbf{Y})$ e $m'(T^n\mathbf{Y})$, que, segundo o Lema 4.2, serão finitas para quase todo $\mathbf{Y}$. Assim, existe $N_1 = N_1(\mathbf{Y})$ tal que $m'(n,\mathbf{Y}) < n, \forall\, n \geqslant N_1$, logo, por sua definição, $m'(n,\mathbf{Y}) = m'(T^n\mathbf{Y})$.

Da mesma forma, pelo Lema 4.3, existe $N_2 = N_2(\mathbf{Y})$ que é tal que $m''(n,\mathbf{Y}) = m''(T^n\mathbf{Y}), \forall\, n \geqslant N_2$.

Assim, para todo $n \geqslant N_0 = N_1 \vee N_2$, tem-se que $\nu_n(\mathbf{Y}) = m'(n,\mathbf{Y}) \vee m''(n,\mathbf{Y}) = m'(T^n\mathbf{Y}) \vee m''(T^n\mathbf{Y}) = \nu(T^n\mathbf{Y})$.

## 4.4 Questões em Aberto e Tópicos de Pesquisas Futuras

A primeira e mais imediata questão que vem à mente é a respeito da distribuição de $\nu$ ou, pelo menos, do menor $\nu$ que garanta o resultado. Em [Sinai, 1993], no final da prova do Lema 4.3, há uma indicação de que é possível encontrar estimativas explicitas a partir dos argumentos da prova.

Além do Teorema 4.1, [Sinai, 1993] enuncia sem provar uma versão mais forte do Teorema provado, que segue:

**Teorema 4.5.** *Existem as variáveis aleatórias $N = N(\mathbf{Y})$ q.c. finita e $\bar{\nu} = \bar{\nu}(\mathbf{Y})$ e as constante $\gamma > 0$ e $\delta = \delta(\varepsilon) > 0$ tais que, para quase todo $\mathbf{Y}$,*

$$P_{0,n}(S_k = s) \leqslant \mathit{const} \cdot \exp\{-\delta \cdot |s|\}$$

*para $|s| \geqslant \bar{\nu}(T^k\mathbf{Y})$, $n \geqslant N_1$ e $\log^\gamma n \leqslant k \leqslant n - \log^\gamma n$,*

indicando apenas que se trata da mesma argumentação um pouco melhorada e empregando melhores estimativas. Seria interessante descobrir quais são essas melhoras que permitem prová-lo.

Outra questão interessante seria mostrar que $\lim_{n\to\infty} P_{0,n}(S_k = s)$ existe para qualquer $k$ fixo, conforme suspeita do autor do artigo, e, mais ambiciosamente, encontrar sua expressão ou alguma estimativa sua.

Além disso, interessa estender, se possível, o argumento da prova para o modelo de vínculo de [Bolthausen and den Hollander, 1997] e [Biskup and den Hollander, 1999], conforme visto na seção 3.5.

Um fato curioso é a semelhança entre a expressão das probabilidades (3.3) e a expressão de especificações de Gibbs (conforme [Georgii, 1988, (2.18),p.30]. Seria interessante confirmar ou refutar essa possibilidade e, em caso afirmativo, trabalhar o conceito de medida de Gibbs aleatória e perguntar se a localização exponencial para todas as caixas $\{-n, \ldots, n\}$ grandes provada por [Sinai, 1993] garante o resultado para a medida de Gibbs resultante das especificações.

Por fim, um interesse particular do autor desse trabalho: Como fazer uma simulação desse tipo de processo e que tipo de informação seria obtida dela?

# Parte II

# Simulação de Alguns Modelos de Processos Interagentes

# Capítulo 5

# Simulação de Processos de Partículas Interagentes

O programa *s3 – Stochastic Spatial Simulator* de Cox e Durrett simula alguns modelos de sistemas de partículas interagentes em $\mathbb{Z}$ e $\mathbb{Z}^2$ mais conhecidos, como o processo de contato, o modelo do votante, o de presa-predador, entre outros.

A ele, foram acrescentados novos módulos como contribuição do aluno com a simulação dos processos de exclusão e de passeio aleatório sobre o modelo de percolação de sítio, brevemente descritos a seguir.

## 5.1 O Programa *s3*

### 5.1.1 O Programa

O programa *s3* foi desenvolvido por Ted Cox (Syracuse University – Syracuse, NY) e Richard Durrett (Cornell University – Ithaca, NY) para plataformas *Unix* que rodem o protocolo de comunicação *X11*.

O programa foi desenvolvido modularmente em linguagem C e a exibição gráfica dos modelos foi implementada unicamente através do protocolo X11. Assim, o programa é altamente portável de uma instalação computacional para outra.

O programa e um tutorial *on-line* sobre os modelos nele implementados podem ser encontrados no *site* `http://gumby.syr.edu/`, mantido pelo Professor Cox.

### 5.1.2 Os Modelos

Os modelos abaixo já vieram originalmente no programa:

- Modelo do Votante Simples, Não-Linear, Viciado e Viciado Cíclico;
- Processo de Contato Simples, Quadrático, Competitivo e a Tempo Discreto;
- Modelo de Presa-Predador Simples, Não-Linear e com Duas Presas;
- Passeio Aleatório Coalescente;
- Modelo de Hibridação com Heterozigoto menos Adaptado;

- Modelo de Richardson (ou de Percolação de Primeira Passagem);
- Modelo Grama-Arbusto-Árvores;
- Modelo de Espécies em Competição;
- Modelo de Colicina;
- Modelo de Superfície de Catalisador; e
- Modelo de Epidemia.

As seguintes contribuições propostas já foram implementadas com sucesso:

- Processo de Exclusão Simétrico Simples;
- Processo de Exclusão Simétrico Simples com destaque entre as partículas que já se moveram e as que ainda não se moveram; e
- Passeio Aleatório sobre Modelo de Percolação de Sítio.

E, como esse é um trabalho que o autor não deseja interromper mesmo após o término da dissertação, as contribuições a seguir são propostas em estudo ou em desenvolvimento:

- Processo de Contato Difusivo;
- Modelo do Sapo (Frog-Air Model); e
- Modelo de Pilha de Areia.

### 5.1.3 As Janelas

Na figura C.1, vê-se cinco janelas, três à esquerda e duas à direita. A janela superior direita é a do módulo principal do programa, onde é exibida a configuração do sistemas, onde cada quadrículo colorida representa uma partícula e sua cor representa o seu estado. Nessa mesma janela, vê-se em sua primeira linha os botões que abrem as outras janelas e, na segunda linha, o botão que termina o programa, o botão que reinicializa a simulação e o botão que a deixa correr ou a interrompe temporariamente. Ao seu lado, fica o indicativo do número de iterações ou o tempo na simulação, dependendo de o modelo ser em tempo discreto ou contínuo.

Abaixo da janela principal, está a janela do gráfico de densidade dos estado. À medida que o tempo avança, a densidade de cada estado vai sendo registrada nessa janela, gerando o gráfico das densidades em função do tempo passado.

Do lado esquerdo da figura, as três janelas são, a partir da superior, a de seleção do modelo, a de seleção da configuração inicial e a dos estados do modelo.

Na janela de seleção do modelo, além de escolha de um dos modelos mencionados na subseção anterior, também permite a escolha e até a alteração dinâmica dos valores dos parâmetros do modelo (*i.e.*, as modificações podem ser feitas sem a necessidade de parar a simulação para que o programa atualize seus valores. O texto explicativos do modelo e as caixas de valores onde os parâmetros são entrados variam em função do modelo selecionado.

Na janela de seleção da configuração inicial, é possível escolher-se entre três tipos de configuração inicial determinística (e seus parâmetros) ou entre duas medidas de probabilidade para a configuração inicial (e seu parâmetros).

A última janela, a dos estados do modelo, permitem a visualização de quais cores estão associadas a quais estados no modelo (que pode assumir até oito estados diferentes). Essa associação é exibida na primeira linha de quadrados colorido. Os quadrados das quatro linhas restantes são apenas para mostrar os códigos das cores.

Ainda há uma sexta janela não exibida nas figuras, a de configurações do programa, onde é possível escolher o número de linhas e de colunas no modelo e a velocidade com a qual o tempo passa.

## 5.2 Modelos de Interesse

Nessa seção, pretende-se apresentar uma introdução breve e simples dos modelos de processos interagentes implementados e dar-se uma referência ao leitor interessado.

### 5.2.1 Processo de Exclusão

O *Processo de Exclusão* foi introduzido no famoso artigo [Spitzer, 1970] para modelar a seguinte situação: uma quantidade (não necessariamente finita) de partículas são distribuídas (de forma aleatória ou não) sobre os sítios do reticulado $\mathbb{Z}^d$ com a restrição de que cada sítio pode comportar apenas uma partícula.

A cada posição $x \in \mathbb{Z}^d$ do reticulado, associa-se o valor

$$\eta(x) = \begin{cases} 1 & \text{se o sítio } x \text{ estiver sendo ocupado por uma partícula} \\ 0 & \text{em caso contrário.} \end{cases}$$

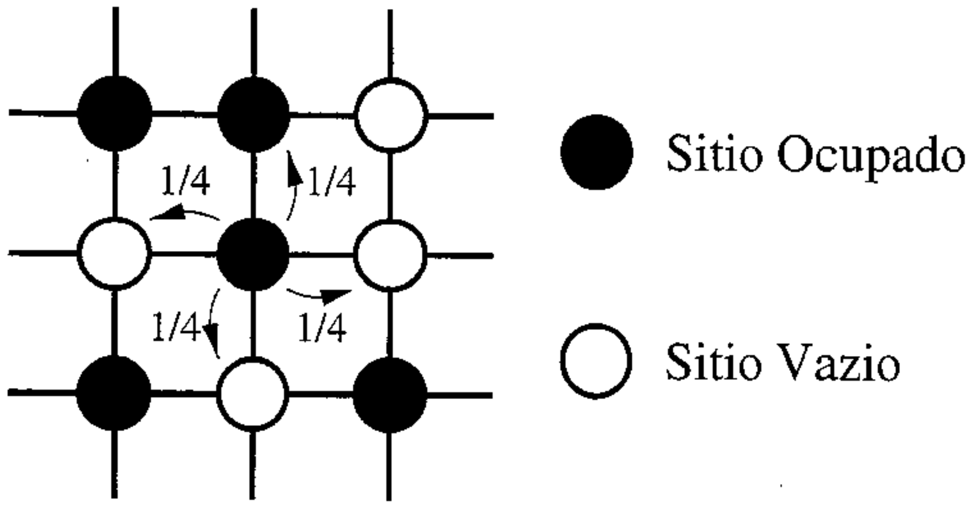


Figura 5.1: Processo de exclusão simétrico em $\mathbb{Z}^2$

Assim, a distribuição das partículas sobre $\mathbb{Z}^d$ é caracterizada pela função $\eta \in \{0,1\}^{\mathbb{Z}^d}$, denominada a *configuração* do sistema, ilustrada pela figura 5.1.

Cada partícula espera um tempo exponencial de parâmetro 1 (independente de tudo o mais no processo) antes de tentar se movimentar. Assim que esse tempo se esgota, a partícula escolhe um sítio $y \in \mathbb{Z}^d$ para onde se mover, de acordo com a matriz de probabilidade de transição $p(x, y)$, que é usualmente a matriz de transição de um passeio aleatório, que, por definição, é invariante por translação, *i.e.*, é tal que $p(x, y) = p(0, y - x)$ para todo $x, y \in \mathbb{Z}^d$.

Uma vez escolhida a posição $y$ para onde se mover, a partícula em $x$ só se moverá para $y$ se essa estiver vazia. Caso ela já esteja sendo ocupada por alguma outra partícula, cancela-se o movimento da partícula $x$ (excluindo-se, assim, esse movimento da dinâmica do processo) e terá que esperar por mais outro tempo exponencialmente distribuído para voltar a ter outra chance. A figura 5.2 ilustra essa dinâmica.

Assim, para cada instante $t$, a situação do sistema pode ser caracterizada por uma configuração $\eta_t = (\eta_t(x) : x \in \mathbb{Z}^d)$.

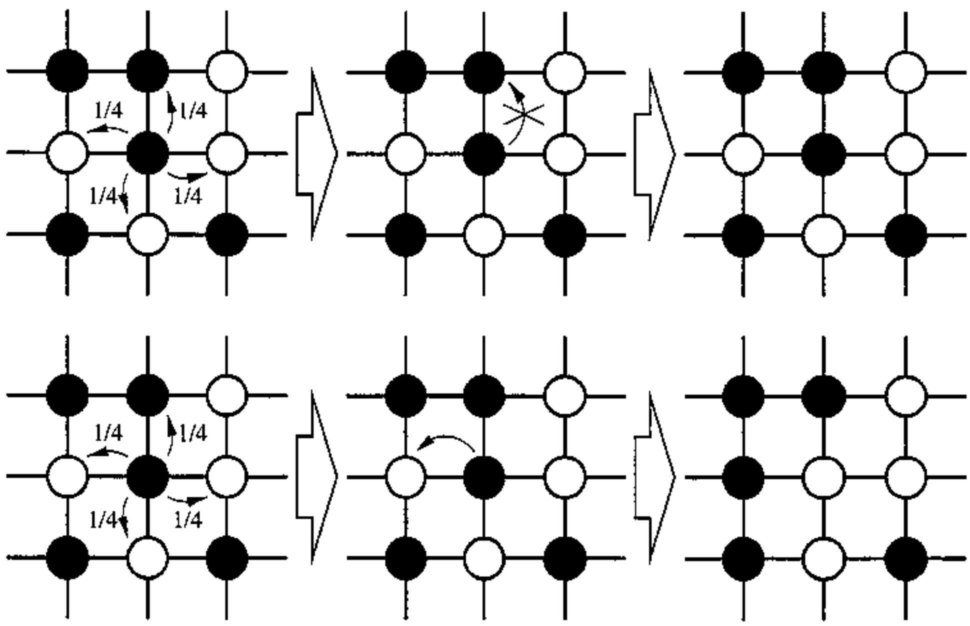


Figura 5.2: Processo de exclusão simétrico em $\mathbb{Z}^2$

Por sua definição, esse é um processo de Markov (em tempo contínuo) com espaço de estado $\mathbf{X} = \{0,1\}^{\mathbb{Z}^d}$.

Mais sobre o modelo pode ser encontrado em [Liggett, 1985].

No apêndice C, as figuras C.2 a C.10 mostram a evolução no tempo de uma simulação desse modelo através do programa *s3*.

### Um Exemplo de uma Realização do Processo de Exclusão

As figuras C.2 até C.10 mostram a evolução do processo de exclusão simples simétrico, onde as quadrículas negras estão associadas aos espaços vazios; as verde escuro, às partículas que ainda não se moveram desde o início da simulação; e as verde claro, às partículas que já se moveram alguma vez desde então.

Sejam $\Omega = \{1, \ldots, N\} \times \{i, \ldots, M\}$, para $N, M \in \mathbb{N}$ e $W = \{i', i''\} \times \{j', j''\}$ para $1 \leqslant i' \leqslant i'' \leqslant N$ e $1 \leqslant j' \leqslant j'' \leqslant M$. Então a partir de uma configuração inicial $\eta_0 \in \{0,1\}^{\Omega}$, o processo de exclusão será $\{\eta_t;\ t \in \mathbb{R}^+\}$.

Nessa simulação, como mostra a figura C.2, a simulação partiu de uma configuração $\eta_0$ retangular, *i.e.*, $eta_0$ era tal que $\eta_0(i,j) = \mathbf{1}_W((i,j))$.

Nesse tipo de configuração inicial, somente as partículas na fronteira entre $W$ e $\Omega \setminus W$ não terão seus movimentos excluídos do modelo. E é isso que ocorre, conforme a figura C.3 indica pela estreita região em verde claro e pela maciça região em verde escuro. À medida que o tempo passa, as partículas que eram da fronteira original já estão vagando pelo meio vazio e, assim, as partículas que estavam atrás delas começam a poder se mover, alargando, assim, as faixa em verde claro vista na figura C.4. Aliás, é também em C.4 que se começa a ver como a janela de densidade de estados funciona: como uma fita de papel registrando as variações instantâneas das densidades.

Nessa janela, a partir da figura C.5, já é possível perceber que a curva superior (em verde escuro) cai exponencialmente, o que confirma um resultado teórico já estabelecido (o que é um dos indicativos de que a simulação opera corretamente).

Nas figura C.5, C.6 e C.7, observa-se que a população de partículas que nunca haviam se movimentado vai caminhando à extinção e que as partículas vão começando a se espalhar mais uniformemente em $\Omega$ (que é a medida invariante do processo), contudo, como pode ser observado na figura C.8, essa caminhada em direção à medida invariante é lenta, já que, após 300 unidades de tempo, ainda se observa uma maior concentração de partículas na região central de $\Omega$, o que diminui muito a probabilidade de o sistema ter atingido estacionariedade temporal.

Nas figuras C.9 e C.10, observa-se um espaço $\Omega = \{1, \ldots, 12\}^2$ muito mais estreito, o

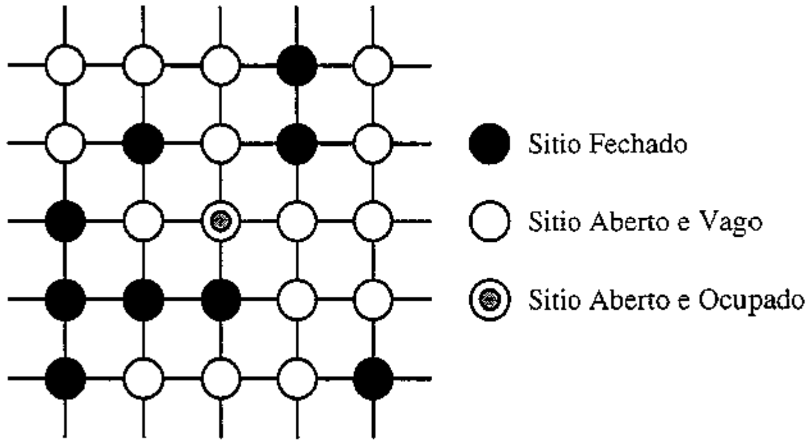


Figura 5.3: Passeio aleatório sobre modelo de percolação de sítio em $\mathbb{Z}^2$

que permite observar mais facilmente o comportamento instantâneo do sistema, descobrindo, através da comparação visual, quais partículas se moveram entre os instantes $t = 0$ e $t = 8$.

### 5.2.2 Passeio Aleatório Sobre o Processo de Percolação

A referência para este modelos é o capítulo 7 de [Hughes, 1996].

Neste modelo, usa-se um meio (aleatório) definido por uma realização super-crítica $\eta = (\eta(x); x \in \mathbb{Z}^2)$ do modelo de percolação de sítio em $\mathbb{Z}^2$, onde $\eta(x) = 1$ se o sítio $x$ estiver aberto e $\eta(x) = 0$ se o sítio $x$ estiver fechado, conforme a figura 5.3.

Sobre a realização $\eta$, é executado um passeio aleatório simples com probabilidade de transição dada por

$$p(x,y) = \begin{cases} \dfrac{\eta(y)}{\sum\limits_{e \in \mathbb{Z}^2 : |e|=1} \eta(x+e)} & \text{se } |x-y| = 1 \\ 0 & \text{em caso contrário,} \end{cases}$$

ou seja, a partícula escolhe se mover para qualquer posição que esteja aberta e seja adjacente

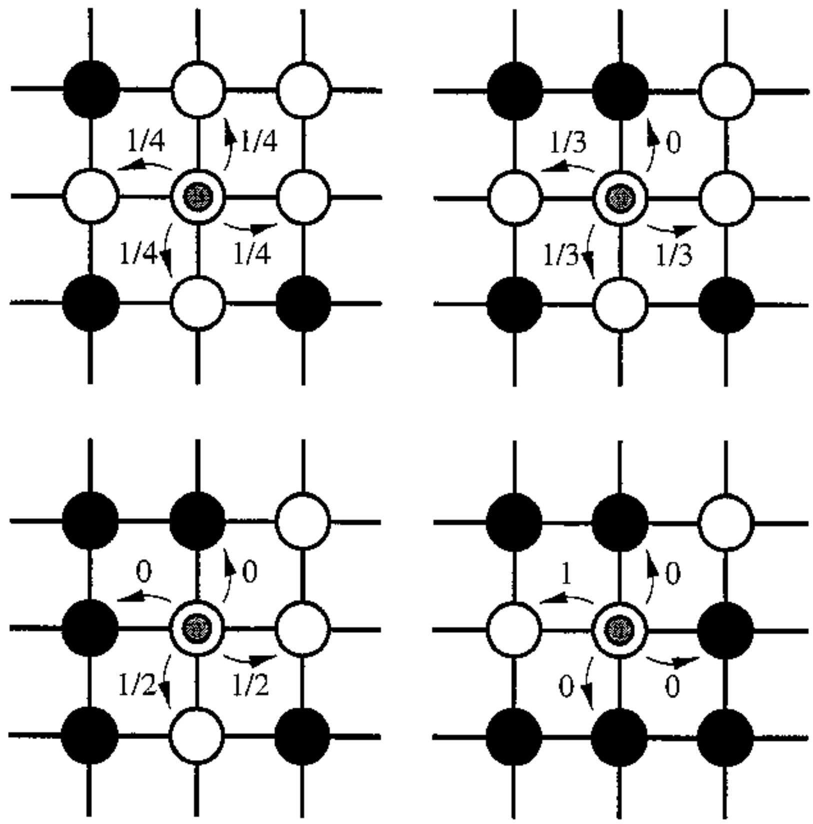


Figura 5.4: Probabilidades de transição $p(x, y)$ do passeio aleatório sobre modelo de percolação de sítio em $\mathbb{Z}^2$

à sua atual com a mesma probabilidade. Esse comportamento é ilustrado pela figura 5.4, que corresponde ao modelo de passeio da formiga míope, conforme aludido em [Hughes, 1996].

# Apêndice A

# Listagem do Programa de Cálculo das Probabilidades

A seguir, a listagem do programa em *S-Plus* que foi usado para gerar as tabelas 3.1, 3.2, 3.3 e 3.4.

```
addlevelwalk <- function(vec){
  aux <- list()
  n <- length(vec[[1]])
  for(i in vec)
    aux <- append(aux,c(list(c(i,i[n]-1)),list(c(i,i[n]+1))))
  aux
}

addlevelpot <- function(vec){
  aux <- list()
  for(i in vec)
    aux <- append(aux,c(list(c(i,-1)),list(c(i,1))))
  aux
}

walktitl <- function(walk){
  aux <- c()
  for(i in walk)
```

```
    aux <- c(aux,paste("(",paste(i,collapse=","),")",sep=""))
  aux
}

pottitl <- function(pot){
  aux <- c()
  for(i in pot)
    aux <- c(aux,paste(ifelse(i<0,"-",ifelse(i>0,"+","0")),collapse=""))
  aux
}

walks <- function(n){
  aux <- c(0)
  while(n > 1) {
    aux <- addlevelwalk(aux)
    n <- n - 1
  }
  list(len = length(aux), paths = aux, titles = walktitl(aux))
}


pots <- function(n){
  aux <- list(c(-1),c(1))
  while(n>1){
    aux <- addlevelpot(aux)
    n <- n-1
  }
  list(len=length(aux),paths=aux,titles=pottitl(aux))
}

sitehamilt <- function(pot,walk,eps){
  if(length(walk)!=length(pot)||eps<0)
    return(null())
  2^(-length(walk)+1)*exp(eps*crossprod(sign(walk),pot))
}

bondhamilt <- function(pot,walk,eps){
  if(length(walk)!=length(pot)+1||eps<0)
    return(null())
  x <- sign(walk)
  pot <- c(0,pot)
  2^(-length(walk)+1)*exp(eps*crossprod(ifelse(x!=0,x,c(0,x)),pot))
}

sitepotentials <- function(n,eps){
  walk <- walks(n)
  pot <- pots(n)
  probs <- hamts <- matrix(0,nrow=pot$len,ncol=walk$len+1)
  for(i in 1:pot$len) {
    for(j in 1:walk$len)
```

```
      hamts[i,c(j,walk$len+1)] <-
        hamts[i,c(j,walk$len+1)]+
          c(1,1)*sitehamilt(pot$paths[[i]],walk$paths[[j]],eps)
    probs[i,] <- hamts[i,]/hamts[i,walk$len+1]
  }
  dimnames(hamts) <- dimnames(probs)
    <- list(pot$titles,c(walk$titles,"Total"))
  list(hamts, probs)
}

bondpotentials <- function(n,eps){
  walk <- walks(n)
  pot <- pots(n-1)
  probs <- hamts <- matrix(0,nrow=pot$len,ncol=walk$len+1)
  for(i in 1:pot$len){
    for(j in 1:walk$len)
      hamts[i,c(j,walk$len+1)] <-
        hamts[i,c(j,walk$len+1)]+
          c(1, 1)*bondhamilt(pot$paths[[i]],walk$paths[[j]],eps)
    probs[i,] <- hamts[i,]/hamts[i,walk$len+1]
  }
  dimnames(hamts) <- dimnames(probs)
    <- list(pot$titles,c(walk$titles,"Total"))
  list(hamts, probs)
}
```

# Apêndice B

# Listagem do Programa da Simulação do Passeio Aleatório Simétrico Simples

A seguir, a listagem do programa em *Mathematica* que foi usado para gerar as simulações das figuras 2.8 e 2.9.

```
Plot[Sqrt[2 x Log[Log[x]]], {x, 0, 100}];
Plot[Sqrt[2 Log[Log[x]]], {x, 0, 100}];

Plot[{x, -x, Sqrt[2 x Log[Log[x]]], -Sqrt[2 x Log[Log[x]]]}, {x,1, 1000},
    PlotRange -> {-100, 100}, AspectRatio -> 200/1000];

X = 0;
S1 = Transpose[
      Table[{(X = X + 2 Random[Integer, {0, 1}] - 1), X/Sqrt[n], X/n},
          {n, 1,10000}]];
X = 0;
S2 = Transpose[
      Table[{(X = X + 2 Random[Integer, {0, 1}] - 1), X/Sqrt[n], X/n},
          {n, 1,10000}]];
ListPlot[S1[[1]]];
ListPlot[S2[[1]]];
```

```
G1 = Plot[{Sqrt[2 x Log[Log[x]]], -Sqrt[2 x Log[Log[x]]]}, {x, 10, 10000},
      PlotRange -> {-250, 250}];
G2 = Plot[{Sqrt[2 Log[Log[x]]], -Sqrt[2 Log[Log[x]]]}, {x, 10, 10000},
      PlotRange -> {-2.5, 2.5}];

A1 = ListPlot[S1[[1]]];
A2 = ListPlot[S1[[2]]];
A3 = ListPlot[S1[[3]]];
B1 = ListPlot[S2[[1]]];
B2 = ListPlot[S2[[2]]];
B3 = ListPlot[S2[[3]]];

Show[G1, A1, B1];
Show[G2, A2, B2];
Show[A3, B3];
```

# Apêndice C

# Imagens do Programa *s3* de Simulação de Sistemas de Partículas Interagentes

A seguir, apresenta-se algumas imagens da execução do programa *s3*, descrito no capítulo 5.

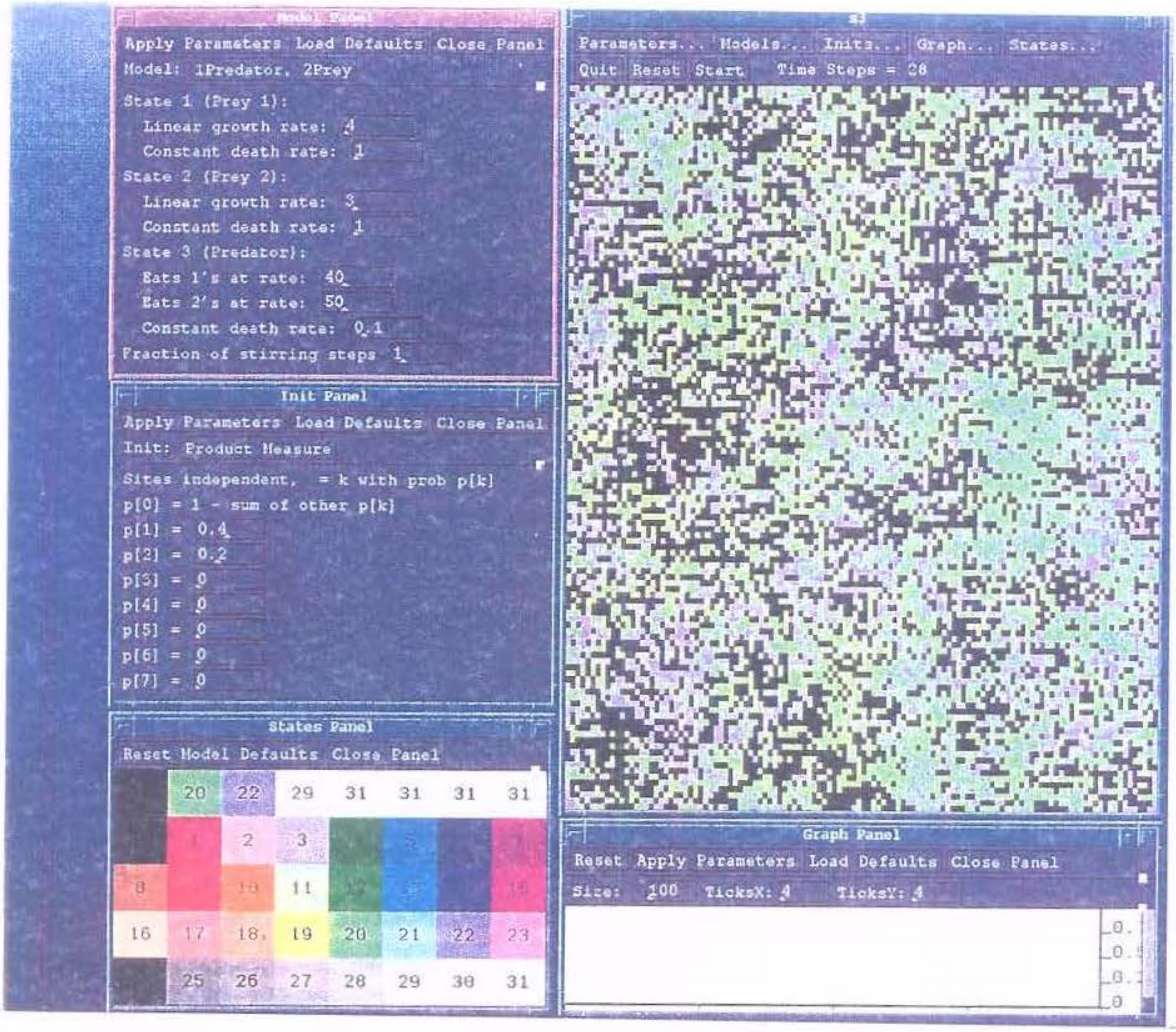
Model Panel
Apply Parameters Load Defaults Close Panel
Model: 1Predator, 2Prey
State 1 (Prey 1):
Linear growth rate: 4
Constant death rate: 1
State 2 (Prey 2):
Linear growth rate: 3
Constant death rate: 1
State 3 (Predator):
Eats 1's at rate: 40
Eats 2's at rate: 50
Constant death rate: 0.1
Fraction of stirring steps 1
Init Panel
Apply Parameters Load Defaults Close Panel
Init: Product Measure
Sites independent, = k with prob p[k]
p[0] = 1 - sum of other p[k]
p[1] = 0.4
p[2] = 0.2
p[3] = 0
p[4] = 0
p[5] = 0
p[6] = 0
p[7] = 0
States Panel
Reset Model Defaults Close Panel
Parameters... Models... Inits... Graph... States...
Quit Reset Start Time Steps = 28
Graph Panel
Reset Apply Parameters Load Defaults Close Panel
Size: 100 TicksX: 4 TicksY: 4

Fig. C.1

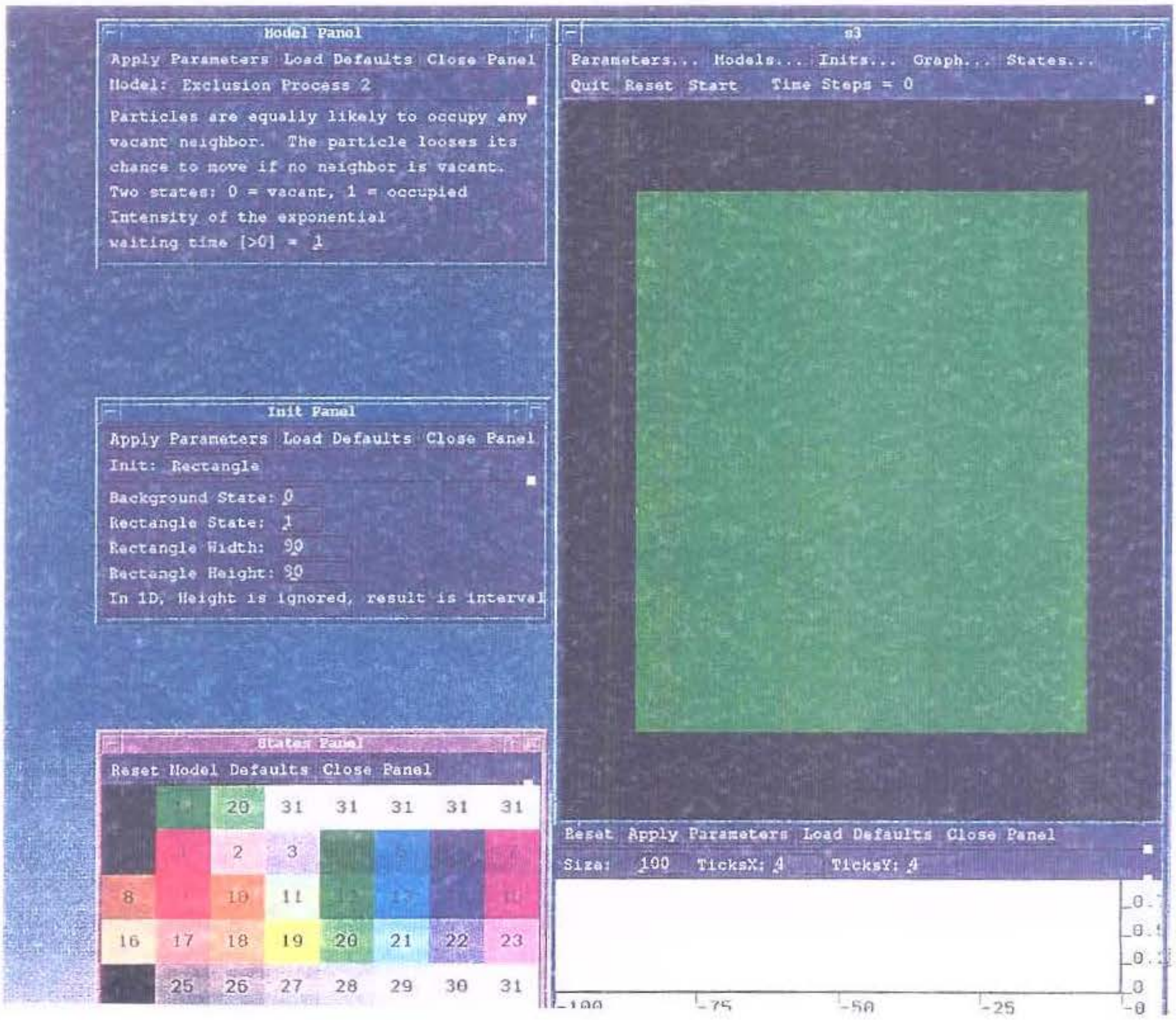
Model Panel
Apply Parameters Load Defaults Close Panel
Model: Exclusion Process 2
Particles are equally likely to occupy any vacant neighbor. The particle looses its chance to move if no neighbor is vacant.
Two states: 0 = vacant, 1 = occupied
Intensity of the exponential waiting time [>0] = 1
Init Panel
Apply Parameters Load Defaults Close Panel
Init: Rectangle
Background State: 0
Rectangle State: 1
Rectangle Width: 90
Rectangle Height: 90
In 1D, Height is ignored, result is interval
States Panel
Reset Model Defaults Close Panel
s3
Parameters... Models... Inits... Graph... States...
Quit Reset Start Time Steps = 0
Reset Apply Parameters Load Defaults Close Panel
Size: 100 TicksX: 4 TicksY: 4

Fig. C.2

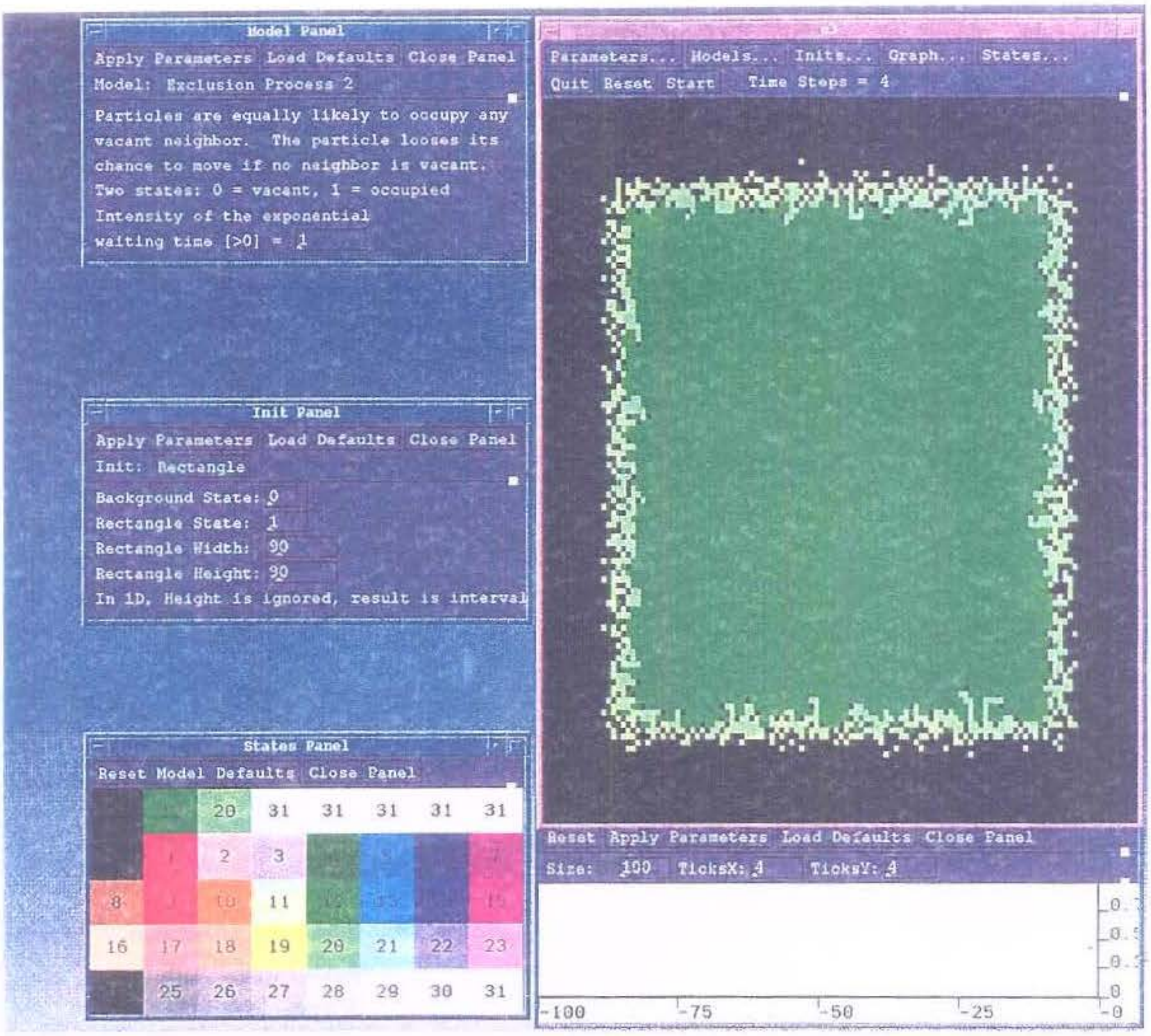
Model Panel
Apply Parameters Load Defaults Close Panel
Model: Exclusion Process 2
Particles are equally likely to occupy any
vacant neighbor. The particle looses its
chance to move if no neighbor is vacant.
Two states: 0 = vacant, 1 = occupied
Intensity of the exponential
waiting time [>0] = 1
Parameters... Models... Inits... Graph... States...
Quit Reset Start Time Steps = 4
Init Panel
Apply Parameters Load Defaults Close Panel
Init: Rectangle
Background State: 0
Rectangle State: 1
Rectangle Width: 90
Rectangle Height: 90
In 1D, Height is ignored, result is interval
States Panel
Reset Model Defaults Close Panel
Reset Apply Parameters Load Defaults Close Panel
Size: 100 TicksX: 4 TicksY: 4
-100
-75
-50
-25
-0

Fig. C.3

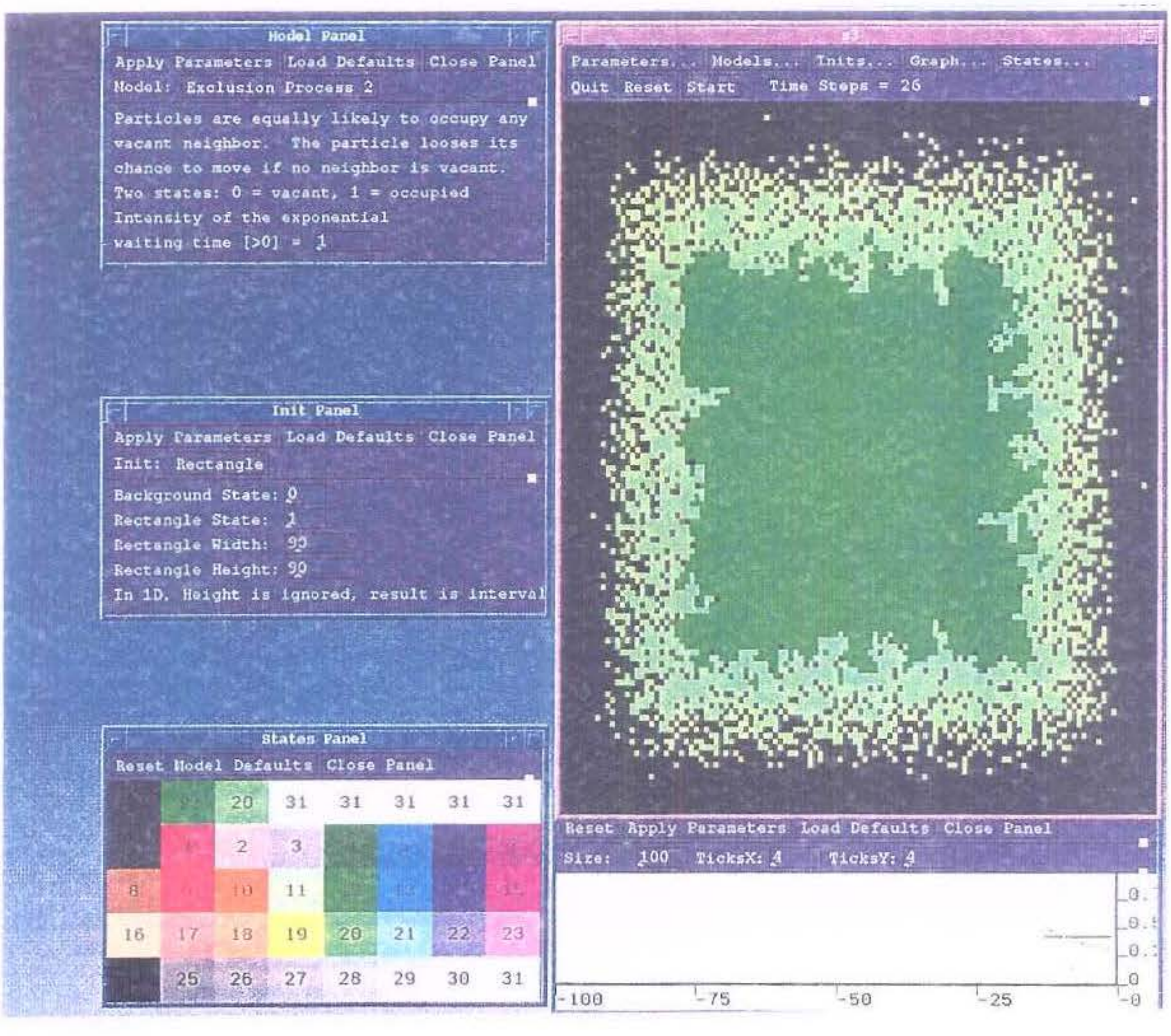
Model Panel
Apply Parameters Load Defaults Close Panel
Model: Exclusion Process 2
Particles are equally likely to occupy any
vacant neighbor. The particle looses its
chance to move if no neighbor is vacant.
Two states: 0 = vacant, 1 = occupied
Intensity of the exponential
waiting time [>0] = 1
Parameters... Models... Inits... Graph... States...
Quit Reset Start Time Steps = 26
Init Panel
Apply Parameters Load Defaults Close Panel
Init: Rectangle
Background State: 0
Rectangle State: 1
Rectangle Width: 90
Rectangle Height: 90
In 1D, Height is ignored, result is interval
States Panel
Reset Model Defaults Close Panel
Reset Apply Parameters Load Defaults Close Panel
Size: 100 TicksX: 4 TicksY: 4
-100
-75
-50
-25
-0

Fig. C.4

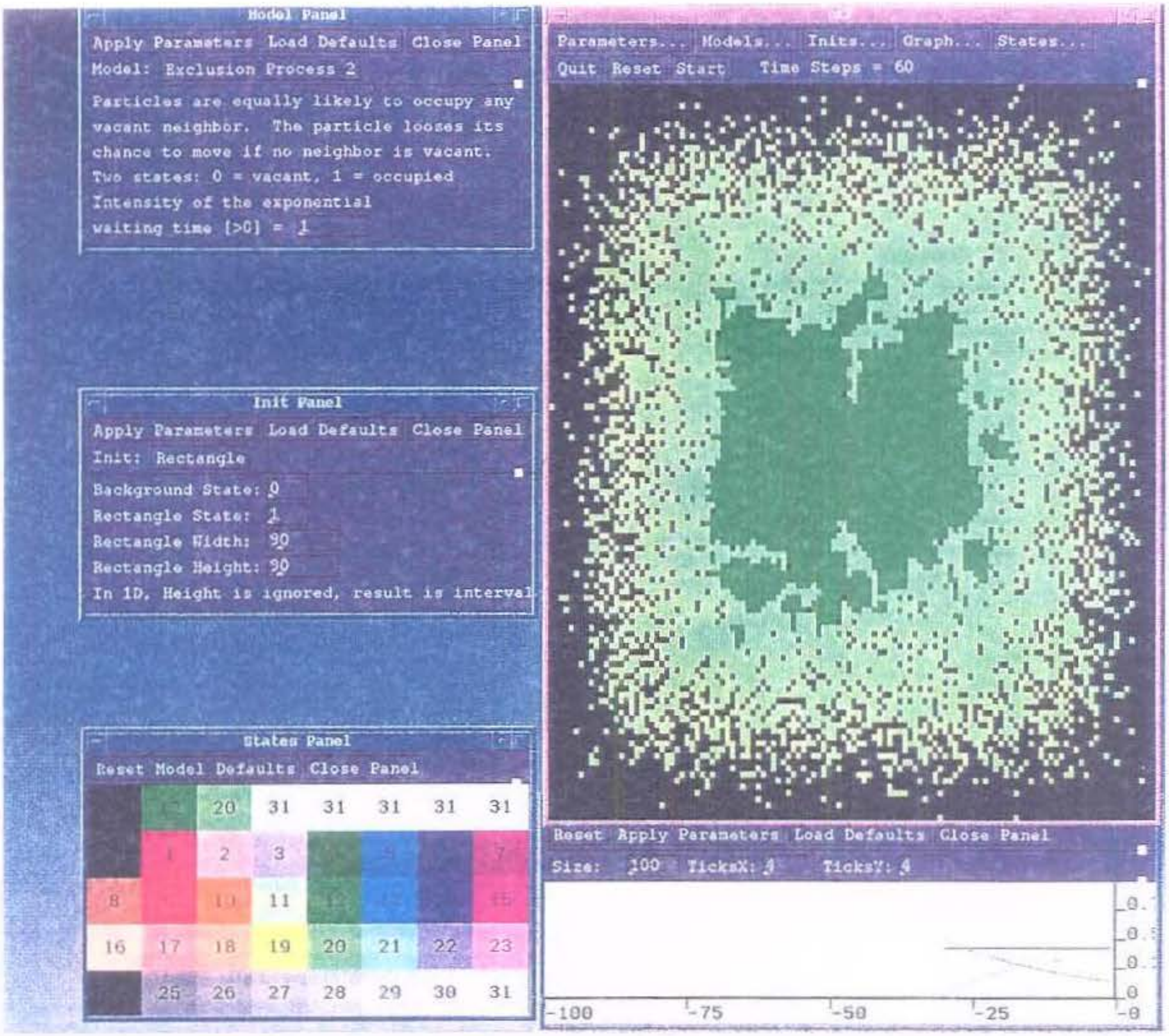
Model Panel
Apply Parameters Load Defaults Close Panel
Model: Exclusion Process 2
Particles are equally likely to occupy any vacant neighbor. The particle looses its chance to move if no neighbor is vacant.
Two states: 0 = vacant, 1 = occupied
Intensity of the exponential waiting time [>0] = 1
Init Panel
Apply Parameters Load Defaults Close Panel
Init: Rectangle
Background State: 0
Rectangle State: 1
Rectangle Width: 90
Rectangle Height: 90
In 1D, Height is ignored, result is interval
States Panel
Reset Model Defaults Close Panel
Parameters... Models... Inits... Graph... States...
Quit Reset Start Time Steps = 60
Reset Apply Parameters Load Defaults Close Panel
Size: 100 TicksX: 4 TicksY: 4
-100
-75
-50
-25
-0

Fig. C.5

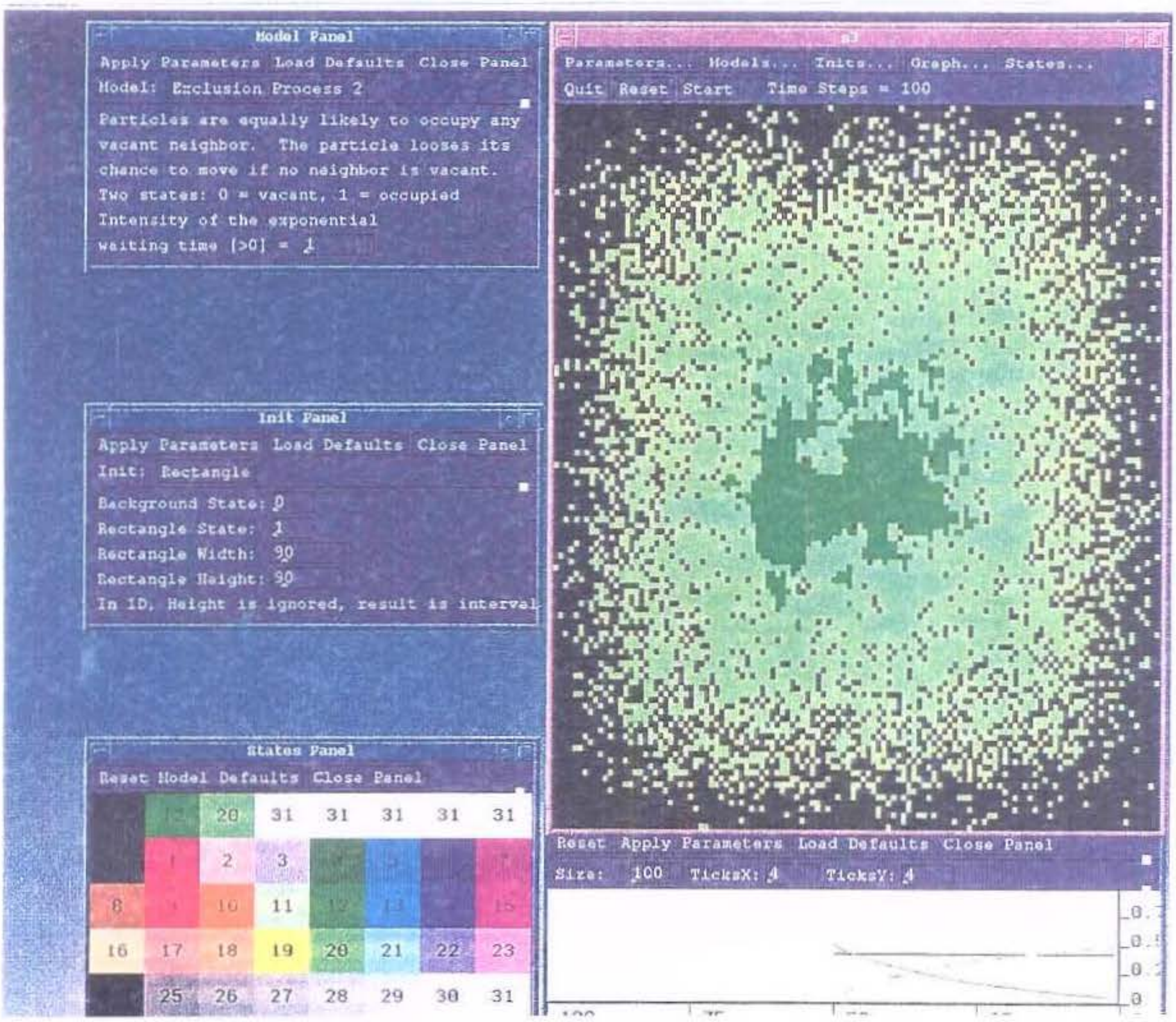
Model Panel
Apply Parameters Load Defaults Close Panel
Model: Exclusion Process 2
Particles are equally likely to occupy any vacant neighbor. The particle looses its chance to move if no neighbor is vacant.
Two states: 0 = vacant, 1 = occupied
Intensity of the exponential waiting time [>0] = 1
Init Panel
Apply Parameters Load Defaults Close Panel
Init: Rectangle
Background State: 0
Rectangle State: 1
Rectangle Width: 90
Rectangle Height: 90
In 1D, Height is ignored, result is interval
States Panel
Reset Model Defaults Close Panel
Parameters... Models... Inits... Graph... States...
Quit Reset Start Time Steps = 100
Reset Apply Parameters Load Defaults Close Panel
Size: 100 TicksX: 4 TicksY: 4

Fig. C.6

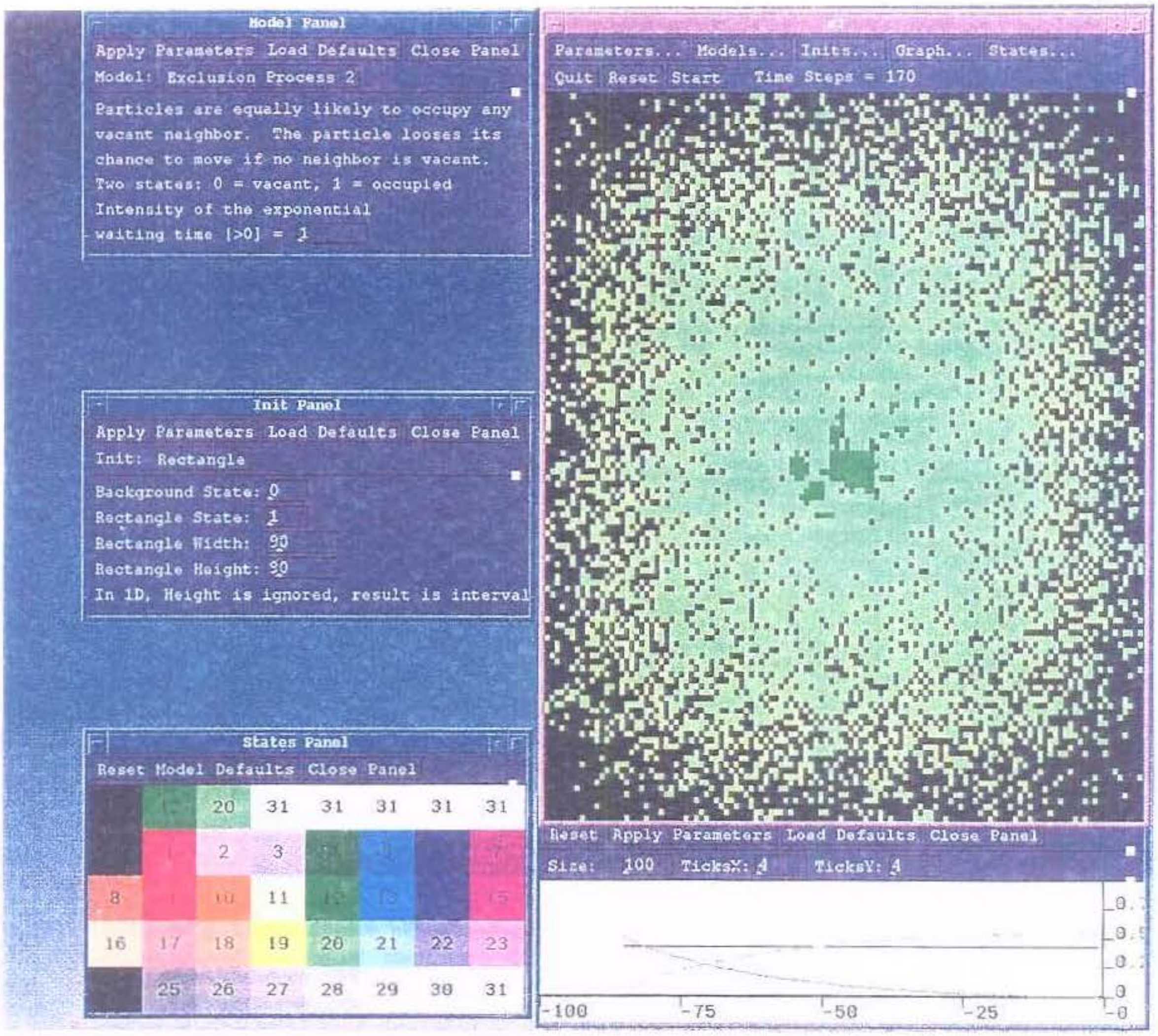
Model Panel
Apply Parameters Load Defaults Close Panel
Model: Exclusion Process 2
Particles are equally likely to occupy any vacant neighbor. The particle looses its chance to move if no neighbor is vacant.
Two states: 0 = vacant, 1 = occupied
Intensity of the exponential waiting time [>0] = 1
Init Panel
Apply Parameters Load Defaults Close Panel
Init: Rectangle
Background State: 0
Rectangle State: 1
Rectangle Width: 90
Rectangle Height: 90
In 1D, Height is ignored, result is interval
States Panel
Reset Model Defaults Close Panel
Parameters... Models... Inits... Graph... States...
Quit Reset Start Time Steps = 170
Reset Apply Parameters Load Defaults Close Panel
Size: 100 TicksX: 4 TicksY: 4
-100
-75
-50
-25

Fig. C.7

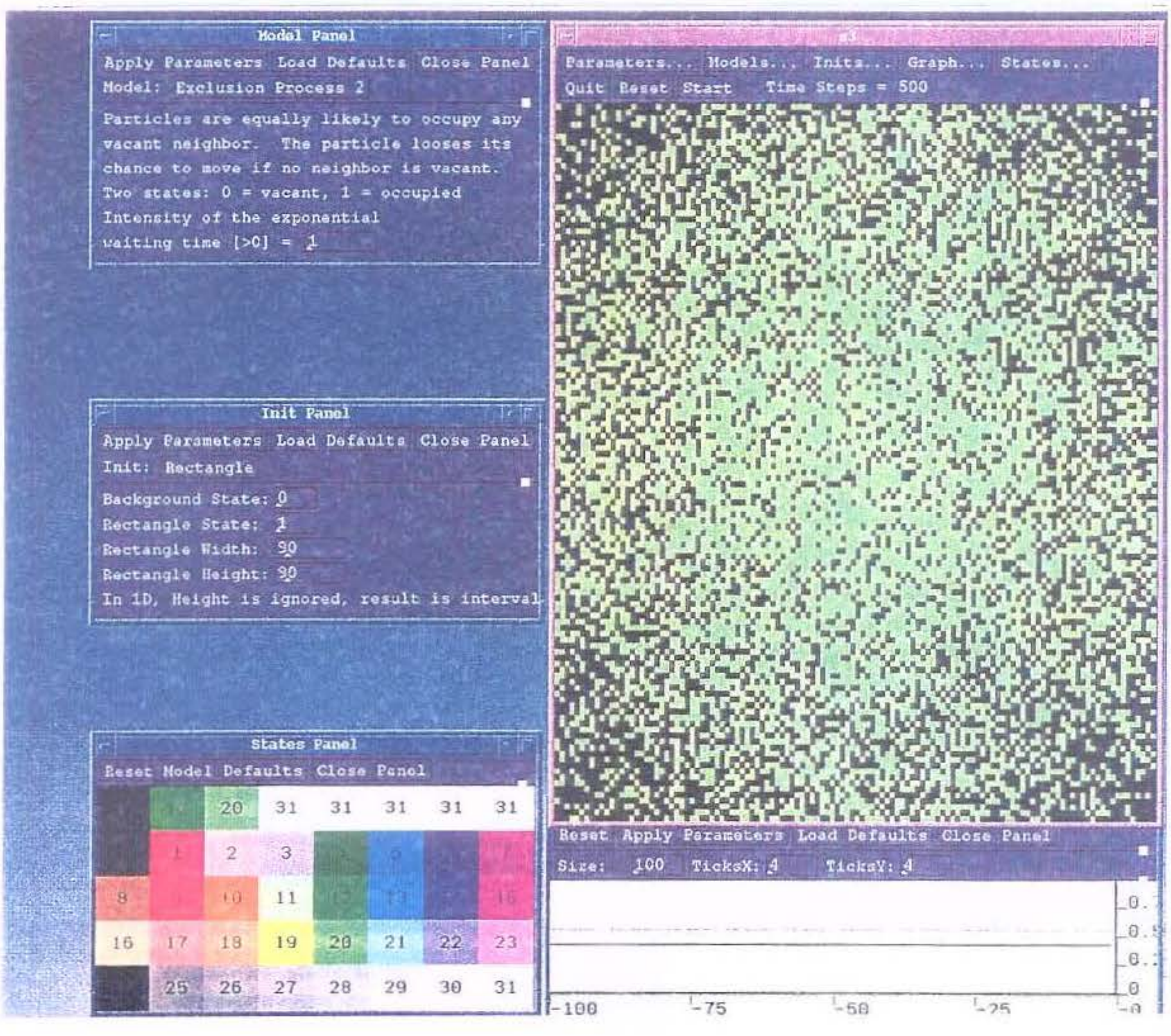
Model Panel
Apply Parameters Load Defaults Close Panel
Model: Exclusion Process 2
Particles are equally likely to occupy any vacant neighbor. The particle looses its chance to move if no neighbor is vacant.
Two states: 0 = vacant, 1 = occupied
Intensity of the exponential waiting time [>0] = 1
Init Panel
Apply Parameters Load Defaults Close Panel
Init: Rectangle
Background State: 0
Rectangle State: 1
Rectangle Width: 90
Rectangle Height: 90
In 1D, Height is ignored, result is interval
States Panel
Reset Model Defaults Close Panel
Parameters... Models... Inits... Graph... States...
Quit Reset Start Time Steps = 500
Reset Apply Parameters Load Defaults Close Panel
Size: 100 TicksX: 4 TicksY: 4
-100
-75
-50
-25

Fig. C.8

70

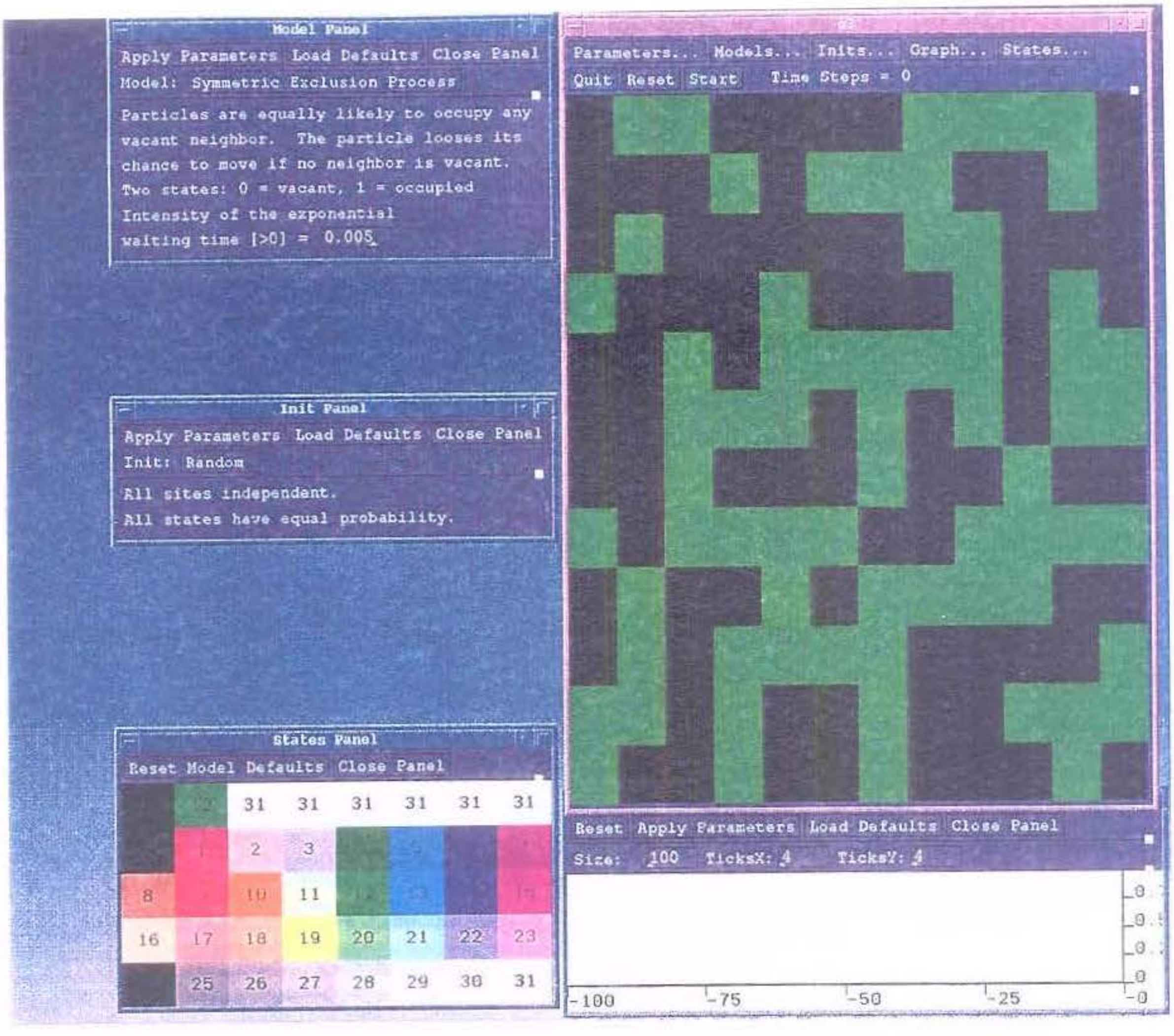


Fig. C.9


Fig. C.10

# Referências Bibliográficas


[Biskup and den Hollander, 1999] Biskup, M. and den Hollander, F. (1999). A heteropolymer near a linear interface. *Ann. Appl. Probab.*, 9(3):668–687.

[Bolthausen and den Hollander, 1997] Bolthausen, E. and den Hollander, F. (1997). Localization transition for a polymer near an interface. *Ann. Probab.*, 25(3):1334–1366.

[Durrett, 1996] Durrett, R. (1996). *Probability: Theory and Examples.* Wadsworth Publishing Company, Belmont, $2^a$ edition.

[Ferrari and Galves, 1997] Ferrari, P. A. and Galves, A. (1997). *Acoplamento e Processos Estocásticos.* IMPA, Rio de Janeiro.

[Garel et al., 1989] Garel, T., Huse, D. A., Leibler, S., and Orland, H. (1989). Localization transition of random chains at interfaces. *Europhys. Lett.*, 8:9–13.

[Georgii, 1988] Georgii, H.-O. (1988). *Gibbs measure and phase transitions.* De Gruyter studies in mathematics: 9. de Gruyter, Berlin, NewYork.

[Grimmett and Stirzaker, 1992] Grimmett, G. R. and Stirzaker, D. R. (1992). *Probability and Random Processes.* Claredon Press, Oxford, $2^a$ edition.

[Grossberg et al., 1994] Grossberg, A., Izrailev, S., and Nechaev, S. (1994). Phase transition in a heteropolymer chain at a selective interface. *Phys. Rev. E*, 50:1912–1921.

[Hughes, 1996] Hughes, B. D. (1996). *Random Walks and Random Environments*, volume Volume 2: Random Environments. Oxford University Press Inc., New York.

[Liggett, 1985] Liggett, T. M. (1985). *Interacting Particle System.* Springer-Verlag, New York.

[Sinai, 1993] Sinai, Y. G. (1993). A random walk with random potential. *Theory Probab. Appl.*, 38(2):382–385.

[Spitzer, 1970] Spitzer, F. (1970). Interaction of Markov Processes. *Adv. Math.*, 5:247–290.