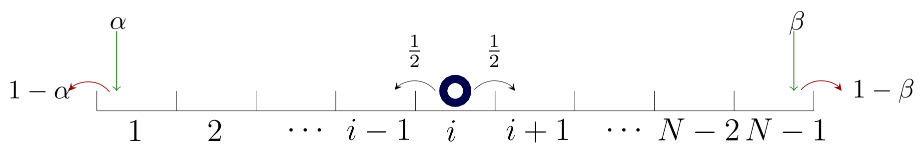
3
Apresentação do processo e resultados preliminares

O Capitulo 1 dá a ferramenta para construir uma cadeia de Markov a tempo contínuo, a partir de uma cadeia de Markov a tempo discreto. Agora, queremos estudar um caso específico, relacionado com sistemas de partículas. Suponhamos que temos $N+1$ sítios, isto é, temos uma malha $\{0, 1, 2, \cdots, N-1, N\}$. No interior da malha, cada sítio contém no máximo uma partícula. Na fronteira, isto é, nos sítios $\{0, N\}$ podemos pensar que existem infinitas partículas, como se tivéssemos reservatórios conetados a esses sítios. Agora em cada sítio da malha existe um relógio com lei exponencial de parâmetro 1, e relógios em sítios diferentes são independentes. Note que a probabilidade de que dois relógios toquem simultaneamente é nula, de fato, pois, as variáveis aleatórias exponencias são contínuas e independentes, assim temos que a região onde as variáveis são iguais, corresponde a uma reta no plano, que é fácil ver que tem medida de Lebesgue 0. Se um relógio num sítio interior da malha toca e se neste sítio há uma partícula, esta partícula pode saltar para um dos seus vizinhos mais próximos com taxa $\frac{1}{2}$ e cumpre a seguinte regra de exclusão: o salto é suprimido se o local já está ocupado. Além disso, se o relógio na borda esquerda toca (resp. na borda direita) as partículas podem entrar no interior da malha com taxa α (resp. β) e podem sair do sítio 1 com taxa $1-\alpha$ (resp. do sítio $N-1$ com taxa $1-\beta$), respeitando a regra de exclusão, com $\alpha, \beta \in [0, 1]$. Assim, cada partícula executa um passeio aleatório a tempo contínuo, condicionado ao evento de que nenhum sítio é ocupado simultaneamente por mais de uma partícula. A figura abaixo, é uma pequena representação da dinâmica do sistema de partículas descrito acima.



3.1
Processo de Exclusão Simples Simétrico em contato com reservatórios

O processo anterior é apresentado de maneira informal, e por isso temos que introduzir notação que permita o desenvolvimento adequado da teoria. Fixe $N \geq 1$, seja $\Lambda_N \stackrel{\text{def}}{=} \{1, 2, 3, \cdots, N-1\} \subseteq \mathbb{N}$. Os elementos de Λ_N são chamados sítios e denotados pelas letras x, y, z, enquanto que no espaço macroscópico (pontos no intervalo $[0, 1]$) os elementos vão se denotar pelas letras u, v, w. Agora o espaço microscópico é denotado por $\{0,1\}^{\Lambda_N}$ e definido por

$$\{0,1\}^{\Lambda_N} = \{\eta : \Lambda_N \to \{0,1\}|\ \eta \text{ é função}\}.$$

Os elementos de $\{0,1\}^{\Lambda_N}$ são chamados configurações. Assim, se $\eta \in \{0,1\}^{\Lambda_N}$ e $x \in \Lambda_N$ então temos $\eta(x) \in \{0,1\}$ e $\eta(x)$ representa o número de partículas no sítio x para a configuração η. Ou seja, se $\eta(x) = 0$ então o sítio x da configuração η está vazio, por outro lado, se $\eta(x) = 1$ isso quer dizer que o sítio x está ocupado.

Para ter uma descrição da taxa de transição entre configurações, precisamos das seguintes operações: se $\eta \in \{0,1\}^{\Lambda_N}$ e $x, y \in \Lambda_N$, então $\eta^x, \eta^{x,y} \in \{0,1\}^{\Lambda_N}$ são definidos por

$$\eta^x(z) = \begin{cases} \eta(z) & \text{se} \quad z \neq x \\ 1-\eta(z) & \text{se} \quad z = x \end{cases}; \qquad \eta^{x,y}(z) = \begin{cases} \eta(z) & \text{se} \quad z \neq x, y \\ \eta(y) & \text{se} \quad z = x \\ \eta(x) & \text{se} \quad z = y \end{cases}.$$

Assim, η^x é obtida de η por trocar seu o valor no sítio x e $\eta^{x,y}$ é obtida de η trocando os seus valores nas posições x e y.

Agora, fixados $\alpha, \beta \in [0,1]$, o processo de exclusão simples simétrico em contato com reservatórios é o processo de Markov cujo espaço de estados é o espaço de configurações $\{0,1\}^{\Lambda_N}$ com gerador infinitesimal dado em $f : \{0,1\}^{\Lambda_N} \to \mathbb{R}$ por

$$(L_N f)(\eta) = (L_{N,0} f)(\eta) + (L_{N,-} f)(\eta) + (L_{N,+} f)(\eta), \tag{3.1}$$

onde

$$\begin{aligned} (L_{N,0} f)(\eta) &= \sum_{x=1}^{N-2} \{f(\eta^{x,x+1}) - f(\eta)\}; \\ (L_{N,-} f)(\eta) &= \{\alpha(1-\eta(1)) + (1-\alpha)\eta(1)\}\{f(\eta^1) - f(\eta)\}; \\ (L_{N,+} f)(\eta) &= \{\beta(1-\eta(N-1)) + (1-\beta)\eta(N-1)\}\{f(\eta^{N-1}) - f(\eta)\}. \end{aligned}$$

Também podemos expressar a ação do operador através de uma multiplicação matricial. Definimos as seguintes matrizes

$$[L_{N,0}](\eta, \xi) = \begin{cases} 1 & \text{se} \quad \xi = \eta^{x,x+1}, 1 \leq x \leq N-2, \xi \neq \eta \\ 0 & \text{se} \quad \xi \neq \eta^{x,x+1}, 1 \leq x \leq N-2 \\ -\sum_{\xi : \xi \neq \eta} L_{N,0}(\eta, \xi) & \text{se} \quad \xi = \eta \end{cases}, \tag{3.2}$$

$$[L_{N,+} + L_{N,-}](\eta,\xi) = \begin{cases} I_\alpha & \text{se} \quad \xi = \eta^1 \\ I_\beta & \text{se} \quad \xi = \eta^{N-1} \\ -(I_\alpha + I_\beta) & \text{se} \quad \xi = \eta \\ 0 & \text{se} \quad \text{caso contrário} \end{cases}, \tag{3.3}$$

onde

$$I_\alpha = (1-\alpha)\eta(1) + \alpha(1-\eta(1)),$$

$$I_\beta = (1-\beta)\eta(N-1) + \beta(1-\eta(N-1)).$$

Assim, se chamarmos $Q_N(\eta,\xi) = [L_{N,0}](\eta,\xi) + [L_{N,+} + L_{N,-}](\eta,\xi)$ e se considerarmos $f = (f(\eta))_{\eta\in\{0,1\}^{\Lambda_N}}$ como um vetor coluna, temos que

$$(L_N f)(\eta)_{\eta\in\{0,1\}^{\Lambda_N}} = (Q_N f(\eta))_{\eta\in\{0,1\}^{\Lambda_N}},$$

onde $Q_N f(\eta)$ representa o produto da matriz Q_N pelo vetor coluna f.
Agora vejamos o seguinte exemplo.

Exemplo 3.1.1. *Considere $z \in \Lambda_N$ e $f_z : \{0,1\}^{\Lambda_N} \to \{0,1\}$ definida por $f_z(\eta) = \eta(z)$. Calculemos $(L_N f_z)(\eta) = (L_N \eta)(z)$.*

No caso $z \in \{2,\cdots,N-2\}$ temos

$$\begin{aligned} L_{N,0}\eta(z) &= \sum_{x=1}^{N-2}\{\eta^{x,x+1}(z) - \eta(z)\} \\ &= \eta(z-1) - \eta(z) + \eta(z+1) - \eta(z) \\ &= \eta(z-1) - 2\eta(z) + \eta(z+1). \\ L_{N,-}\eta(z) &= 0. \\ L_{N,+}\eta(z) &= 0. \end{aligned}$$

No caso $z = 1$ temos

$$\begin{aligned} L_{N,0}\eta(1) &= \sum_{x=1}^{N-2}\{\eta^{x,x+1}(1) - \eta(1)\} \\ &= \eta(2) - \eta(1). \\ L_{N,-}\eta(1) &= (\alpha(1-\eta(1)) + (1-\alpha)\eta(1))\left(\eta^1(1) - \eta(1)\right) \\ &= (\alpha(1-\eta(1)) + (1-\alpha)\eta(1)\}\{1 - 2\eta(1)) \\ &= \alpha - \eta(1). \\ L_{N,+}\eta(1) &= 0. \end{aligned}$$

Note que pela equação (3.1) neste caso se tem que

$$L_N\eta(1) = \eta(2) - \eta(1) + \alpha - \eta(1).$$

Similarmente, se $z = N-1$ teremos

$$\begin{aligned} L_{N,0}\eta(N-1) &= \eta(N-2) - \eta(N-1). \\ L_{N,-}\eta(N-1) &= 0. \\ L_{N,+}\eta(N-1) &= \beta - \eta(N-1). \end{aligned}$$

Note-se que pela equação (3.1) neste caso se tem que

$$L_N\eta(N-1) = \eta(N-2) - \eta(N-1) + \beta - \eta(N-1).$$

Assim, se $\eta(0) = \alpha$ e $\eta(N) = \beta$ temos

$$L_N\eta(z) = \eta(z-1) - 2\eta(z) + \eta(z+1), \, \forall z \in \Lambda_N.$$

□

3.2 Notações e ferramentas

Seja $D([0,+\infty), \{0,1\}^{\Lambda_N})$ o espaço de trajetórias $\eta_\cdot$ càdlàg, e seja $\{\mathbb{P}_\eta\}_{\eta\in\{0,1\}^{\Lambda_N}}$ o processo de Markov com gerador infinitesimal L_N introduzido em (3.1). Assim temos que $\mathbb{P}_\eta$ tem a propriedade

$$\mathbb{P}_\eta\left(\eta_\cdot \in D([0,+\infty), \{0,1\}^{\Lambda_N}) : \eta_0 = \eta\right) = 1$$

e a perda de memória, no sentido

$$\mathbb{P}_\eta(\eta_{s+t} \in A|\mathcal{F}_s) = \mathbb{P}_{\eta_s}(\eta_t \in A),$$

onde $\mathcal{F}_s$ é a σ-álgebra gerada por $\{\eta_r : r \leq s\}$. Esta propriedade quer dizer que para saber o futuro no tempo $t+s$, sabendo todo o passado até ao tempo s só interessa o presente ou seja, o estado do processo no tempo s.
Agora definimos $C(\{0,1\}^{\Lambda_N}) = \{f : \{0,1\}^{\Lambda_N} \to \mathbb{R}, f \text{ contínua}\}$, que é um espaço de Banach quando munido com a norma $\|f\| = \sup_{\eta\in\{0,1\}^{\Lambda_N}} |f(\eta)|$. Denotemos por S_t o semigrupo associado ao processo $\{\mathbb{P}_\eta\}_{\eta\in\{0,1\}^{\Lambda_N}}$ que definimos em $C(\{0,1\}^{\Lambda_N})$ por

$$S_t f(\eta) = \mathbb{E}_\eta[f(\eta_t)] = \int f(\eta_t) d\mathbb{P}_\eta, \tag{3.4}$$

onde $\eta_0 = \eta$ e $f \in C(\{0,1\}^{\Lambda_N})$. Vamos considerar, $\{\mathbb{P}_\eta\}_{\eta \in \{0,1\}^{\Lambda_N}}$ como um processo de Feller como na Definição 2.3.3. Note que $C_b(\{0,1\}^{\Lambda_N}) = C(\{0,1\}^{\Lambda_N})$, pois $\{0,1\}^{\Lambda_N}$ é compacto. Logo, para cada $f \in C(\{0,1\}^{\Lambda_N})$ e cada $t \geq 0$ temos que $S_t f \in C(\{0,1\}^{\Lambda_N})$. Assim temos que $\{S_t\}_{t\geq 0}$ é um semigrupo de Markov, e isto garante que nosso processo $\{\mathbb{P}_\eta\}_{\eta \in \{0,1\}^{\Lambda_N}}$ existe e é o único que satisfaz (3.4) para cada $f \in C(\{0,1\}^{\Lambda_N})$, $\eta \in \{0,1\}^{\Lambda_N}$ e $t \geq 0$.

Seja $\mathcal{P}(\{0,1\}^{\Lambda_N})$ o conjunto das medidas de probabilidade em $\{0,1\}^{\Lambda_N}$ munido da convergência fraca. Isto é, $\mu_n \xrightarrow[n\uparrow\infty]{} \mu$ em $\mathcal{P}(\{0,1\}^{\Lambda_N})$, se e somente se,

$$\int f(\eta)\mu_n(d\eta) \xrightarrow[n\uparrow\infty]{} \int f(\eta)\mu(d\eta),$$

para toda função $f \in C(\{0,1\}^{\Lambda_N})$. Agora, podemos identificar $\mathcal{P}(\{0,1\}^{\Lambda_N})$ com um subconjunto do espaço dual de $C(\{0,1\}^{\Lambda_N})$ tomando

$$\langle \mu, f\rangle = \int_{\{0,1\}^{\Lambda_N}} f(\eta)\mu(d\eta)$$

, para cada $f \in C(\{0,1\}^{\Lambda_N})$. Então temos que, $\mathcal{P}(\{0,1\}^{\Lambda_N}) \subseteq C^*(\{0,1\}^{\Lambda_N})$ e com essa identificação a topologia fraca coincide com a topologia fraca estrela. Pelo Teorema de Banach-Alaoglu como $\{0,1\}^{\Lambda_N}$ é compacto então $\mathcal{P}(\{0,1\}^{\Lambda_N})$ também é compacto. Além disso, como $C(\{0,1\}^{\Lambda_N})$ é um espaço de Banach separável e $\mathcal{P}(\{0,1\}^{\Lambda_N})$ é compacto com a topologia fraca, então podemos metrizar $\mathcal{P}(\{0,1\}^{\Lambda_N})$ com esta topologia. Agora, se $\mu \in \mathcal{P}(\{0,1\}^{\Lambda_N})$ e $\{\mathbb{P}_\eta\}_{\eta \in \{0,1\}^{\Lambda_N}}$ é um processo de Markov, então o correspondente processo de Markov com distribuição inicial μ é um processo estocástico $\{\eta_t\}_{t\geq 0}$ com distribuição

$$\mathbb{P}_\mu(A) = \int_{\{0,1\}^{\Lambda_N}} \mathbb{P}_\eta(A)\mu(d\eta).$$

Com isto temos que $\mathbb{E}_\mu[f(\eta_t)] = \int S_t f(\eta)\mu(d\eta)$, para toda $f \in C(\{0,1\}^{\Lambda_N})$. Assim, podemos definir a medida μS_t por:

$$\int f(\eta)\mu S_t(d\eta) = \int S_t f(\eta)\mu(d\eta), \text{ para } f \in C(\{0,1\}^{\Lambda_N}),$$

que podemos interpretar como a distribuição no tempo t do processo $\{\eta_t\}_{t\geq 0}$ partindo da distribuição inicial μ.

3.3 Medidas Invariantes

Se uma medida $\mu \in \mathcal{P}(\{0,1\}^{\Lambda_N})$ para um processo de Markov $\{S_t\}_{t\geq 0}$ satisfaz $\mu S_t = \mu$ para todo $t \geq 0$ então dizemos que a medida é invariante para o processo. O conjunto de todas as medidas invariantes $\mu \in \mathcal{P}(\{0,1\}^{\Lambda_N})$ é denotado por $\mathcal{I}(\{0,1\}^{\Lambda_N})$.
Então podemos ver que $\mu \in \mathcal{I}(\{0,1\}^{\Lambda_N})$, se e somente se, $\forall f \in C(\{0,1\}^{\Lambda_N})$ se tem que

$$\int S_t f(\eta)\mu(d\eta) = \int f(\eta)\mu S_t(d\eta) = \int f(\eta)\mu(d\eta),$$

o que é equivalente a

$$\int \left(S_t f(\eta) - f(\eta)\right)\mu(d\eta) = 0.$$

E assim podemos dizer que $S_t f = f, \quad \mu -$ quase certamente.
Sabemos pela Definição 2.4.4, que o gerador em (3.1) é definido por

$$Lf = \lim_{t\downarrow 0} \frac{S_t f - f}{t}, \tag{3.5}$$

com domínio $\mathcal{D}(L) = \left\{ f \in C(\{0,1\}^{\Lambda_N}) : \lim_{t\downarrow 0} \frac{S_t f - f}{t} \text{ existe} \right\}$. O Teorema de Hille-Yosida diz que a relação entre o semigrupo e o operador é bijetiva (ver [11],página 16).
Para o gerador de Markov L em $C(\{0,1\}^{\Lambda_N})$, um espaço $D \subseteq \mathcal{D}(\mathcal{L})$ se chama cerne se o gráfico de L é o fecho do gráfico de $L\mid_D$.

Proposição 3.3.1. *Suponha que D é um cerne de um gerador L de um semigrupo de Markov S_t. Então*

$$\mathcal{I} = \left\{ \mu \in \mathcal{P}(\{0,1\}^{\Lambda_N}) : \int Lf(\eta)\mu(d\eta) = 0 \textit{ para toda } f \in D \right\}.$$

A demonstração da proposição anterior segue do Teorema 2.5.2 no capítulo 1. Agora, dizemos que uma medida $\mu \in \mathcal{P}(\{0,1\}^{\Lambda_N})$ é reversível com respeito ao processo com semigrupo S_t se

$$\int f(\eta)S_t g(\eta)\mu(d\eta) = \int g(\eta)S_t f(\eta)\mu(d\eta),$$

para toda $f, g \in C(\{0,1\}^{\Lambda_N})$. O conjunto de todas as medidas reversíveis é denotado por $\mathcal{R}(\{0,1\}^{\Lambda_N})$. Note que se tomamos $g \equiv 1$ temos que $\mathcal{R}(\{0,1\}^{\Lambda_N}) \subseteq \mathcal{I}(\{0,1\}^{\Lambda_N})$.

Exemplo 3.3.2. *Seja $\nu^N_{\alpha,\beta}$ uma medida invariante do processo em estudo, e defina $\rho^N(x) := \mathbb{E}_{\nu^N_{\alpha,\beta}}[\eta(x)]$. Então ρ^N é solução da equação discreta dada por*

$$\begin{cases} \Delta_N \rho^N(x) = 0 \quad \textit{para} \quad x \in \Lambda_N \\ \rho^N(0) = \alpha \\ \rho^N(N) = \beta \end{cases},$$

onde definimos o laplaciano discreto de ρ^N em $x \in \Lambda_N$ por

$$\Delta_N \rho^N(x) = N^2\{\rho^N(x-1) - 2\rho^N(x) + \rho^N(x+1)\}. \tag{3.6}$$

Solução. Pelo Exemplo 3.1.1, temos que, para todo $x \in \Lambda_N$ se tem que

$$L_N \eta(x) = \eta(x-1) - 2\eta(x) + \eta(x+1).$$

Assim, pela definição de laplaciano discreto

$$\begin{aligned} \Delta_N \rho^N(x) &= N^2\{\rho^N(x-1) - 2\rho^N(x) + \rho^N(x+1)\} \\ &= N^2\{\mathbb{E}_{\nu^N_{\alpha,\beta}}[\eta(x-1)] - 2\mathbb{E}_{\nu^N_{\alpha,\beta}}[\eta(x)] + \mathbb{E}_{\nu^N_{\alpha,\beta}}[\eta(x+1)]\}. \end{aligned}$$

Logo, como a esperança é linear temos

$$\begin{aligned} \Delta_N \rho^N(x) &= \mathbb{E}_{\nu^N_{\alpha,\beta}}[N^2\{\eta(x-1) - 2\eta(x) + \eta(x+1)\}] \\ &= \mathbb{E}_{\nu^N_{\alpha,\beta}}[N^2 L_N \eta(x)]. \end{aligned}$$

Agora, tomando $L = N^2 L_N$ e como $\nu^N_{\alpha,\beta}$ é uma medida invariante do processo, então temos que para $f_x(\eta) = \eta(x)$, se tem que

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{\nu^N_{\alpha,\beta}}[Lf_x(\eta)] = \int S_t L f_x(\eta) \nu^N_{\alpha,\beta}(d\eta) \\ = \int L f_x(\eta) \nu^N_{\alpha,\beta} S_t(d\eta) = \int L f_x(\eta) \nu^N_{\alpha,\beta}(d\eta) = 0. \end{aligned}$$

Logo $\Delta_N \rho^N(x) = 0$, $\forall x \in \Lambda_N$.

□

Definição 3.3.3. *Dada uma função $\rho : \Lambda_N \to [0,1]$, vamos chamar $\nu^N_{\rho(\cdot)} := \nu_{\rho(\cdot)}$ à medida produto em $\{0,1\}^{\Lambda_N}$ definida por*

$$\nu_{\rho(\cdot)}\big(\eta \in \{0,1\}^{\Lambda_N} : \eta(x) = 1, \forall x \in A \ e \ \eta(y) = 0, \forall y \in B\big) = \prod_{x \in A} \rho(x) \prod_{y \in B} (1 - \rho(y)),$$

para quaisquer conjuntos A,B conjuntos disjuntos em Λ_N.

No caso que $\rho(x) = \rho$ chama-se a ν_ρ a medida de Bernoulli produto em $\{0,1\}^{\Lambda_N}$ de parâmetro ρ, e que satisfaz

$$\nu_\rho\left(\eta \in \{0,1\}^{\Lambda_N} : \eta(x) = 1, \forall x \in A \text{ e } \eta(y) = 0, \forall y \in B\right) = \rho^{|A|}(1-\rho)^{|B|},$$

com A,B disjuntos em Λ_N. Para o nosso processo vamos denotar a medida de Bernoulli por ν_ρ^N ou ν_ρ no caso que N seja claro. Note que a definição acima é equivalente a tomar $f_x(\eta) = \eta(x)$ para $x \in \Lambda_N$, como v.a.'s independentes com distribuição de Bernoulli de parâmetro ρ. Assim, temos que

$$\nu_\rho^N(\eta) = \rho^{\sum_{x=1}^{N-1}\eta(x)}(1-\rho)^{\sum_{x=1}^{N-1}(1-\eta(x))}. \tag{3.7}$$

Note que para o processo $\{\eta_t\}_{t\geq 0}$ podemos obter medidas de probabilidade invariantes ν que tornam o processo reversível mediante a equação

$$\nu(\eta)Q_N(\eta,\xi) = \nu(\xi)Q_N(\xi,\eta), \text{para todo } \eta,\xi \in \{0,1\}^{\Lambda_N}. \tag{3.8}$$

Proposição 3.3.4. *Se $\alpha = \beta$ então a medida ν_α é invariante e reversível.*

Demonstração. Basta ver que ν_α satisfaz (3.8). Para isto usamos as matrizes definidas em (3.2) e (3.3).

– No caso em que $\eta = \xi$, temos imediatamente que

$$\nu_\alpha(\eta)Q_N(\eta,\eta) = \nu_\alpha(\eta)Q_N(\eta,\eta).$$

– No caso em que $\xi \notin \{\eta, \eta^1, \eta^{N-1}, \eta^{x,x+1}\}$ temos pelas matrizes consideradas que

$$Q_N(\eta,\xi) = Q_N(\xi,\eta) = 0.$$

– No caso em que $\xi = \eta^{x,x+1}$. Para este caso temos que

$$Q_N(\eta,\xi) = Q_N(\xi,\eta) = 1.$$

Logo como a operação $\eta^{x,x+1}$ só troca posições e como a medida ν_α não depende das posições (depende da quantidade de partículas) então temos que

$$\nu_\alpha(\eta^{x,x+1}) = \nu_\alpha(\eta).$$

– No caso em que $\xi = \eta^1$ e $\eta(1) = 0$, notemos que $Q_N(\eta,\xi) = I_\alpha$, mas $\eta(1) = 0$ então temos $Q_N(\eta,\xi) = \alpha$. De maneira análoga podemos ver que $\eta = \eta^1$ e $\xi(1) = 1$, assim temos $Q_N(\xi,\eta) = 1-\alpha$.

Logo, por (3.7) e lembrando que a medida ν_α só depende da quantidade de partículas, temos que

$$\nu_\alpha(\xi) = \nu_\alpha(\eta^1) = \frac{\alpha}{1-\alpha}\nu_\alpha(\eta),$$

assim temos que $\nu_\alpha(\eta)Q_N(\eta,\xi) = \nu_\alpha(\xi)Q_N(\xi,\eta)$.

– Nos casos restantes, se age de forma análoga ao último caso.

□

3.4 Do microscópico para o macroscópico

O espaço macroscópico é o espaço que representa o espaço contínuo, aqui o espaço macroscópico é o intervalo $I = [0,1]$, e a discretização é $\Lambda_N = \{1, 2, \cdots, N-1\}$ que representa o espaço microscópico. Podemos considerar o espaço Λ_N contido no espaço I, fazendo a seguinte identificação: uma posição u no sistema macroscópico I se identifica com o sítio $\lfloor uN \rfloor$ do sistema microscópico Λ_N. De maneira similar, vamos identificar $x \in \Lambda_N$ com $\frac{x}{N} \in I$.
Agora, no sistema microscópico, as partículas são colocadas de acordo com alguma medida de probabilidade, e estas se mexem de acordo com alguma taxa de transição probabilística respeitando as restrições do sistema específico. Já vimos isto acima na descrição do nosso modelo. Agora, estamos interessados em estudar o comportamento temporal de um perfil de densidade. Para tal temos que considerar diferentes escalas de tempos, um tempo macroscópico t e um tempo microscópico $t\theta(N)$. Para o processo estudado temos que tomar $\theta(N) = N^2$. Note que com a definição do gerador temos que

$$\theta(N)L_N f = \lim_{t\downarrow 0} \theta(N)\frac{S_t f - f}{t},$$

e se fizermos uma troca de variável $t = \theta(N)s$ temos que

$$\theta(N)L_N f = \lim_{s\downarrow 0} \frac{S_{s\theta(N)}f - f}{s} = \tilde{L}_N,$$

ou seja, $\tilde{L}_N = \theta(N)L_N f$ é o gerador do semigrupo $S_{t\theta(N)}$. Então, de agora em diante vamos denotar por η_t o processo de Markov em $\{0,1\}^{\Lambda_N}$ com gerador $N^2 L_N$. Ou seja, o tempo microscópico no nosso modelo é tN^2.
Agora que sabemos como lidar com os espaços macroscópico e microscópico, podemos generalizar a Definição 3.3.3.

Definição 3.4.1. *Dada uma função* $\rho_0 : [0,1] \to [0,1]$*, a medida produto Bernoulli com parâmetro de variação lenta associada ao perfil* ρ_0*, denotada por* $\nu^N_{\rho_0(\cdot)}$*, é a medida no espaço de estados* $\{0,1\}^{\Lambda_N}$ *que satisfaz as seguintes propriedades:*

- *As variáveis aleatórias* $\{\eta(x)\}_{x\in\Lambda_N}$ *são independentes com respeito a* $\nu^N_{\rho_0(\cdot)}$ *.*
- *Cada* $\eta(x)$ *tem distribuição Bernoulli de parâmetro* $\rho_0\left(\dfrac{x}{N}\right)$*.*
  Ou seja,

$$\nu_{\rho_0(\cdot)}\left(\eta \in \{0,1\}^{\Lambda_N} : \eta(x_1) = i_1, \eta(x_2) = i_2, \cdots, \eta(x_k) = i_k\right) = \prod_{j=1}^{k} \rho_0\left(\frac{x_j}{N}\right)^{i_j}\left(1-\rho_0\left(\frac{x_j}{N}\right)\right)^{1-i_j},$$

para todo $x_j \in \Lambda_N$*,* $i_j \in \{0,1\}$ *com* $j = 1, \cdots, k$*.*

3.5 Deduções das EDP's discretas

Podemos agora introduzir alguns fatos importantes sobre as equações diferenciais parciais discretas com que iremos lidar nesta dissertação.

Definição 3.5.1. *Dada* ν^N *uma medida de probabilidade em* $\{0,1\}^{\Lambda_N}$*, vamos definir para* $x \in \Lambda_N$ *a função*

$$\rho^N_t(x) := \mathbb{E}_{\nu^N}[\eta_{tN^2}(x)].$$

Estendemos a definição às fronteiras tomando $\rho^N_t(0) = \alpha$*,* $\rho^N_t(N) = \beta$*.*

Note que pelas equações de Chapman-Kolmogorov temos que

$$\partial_t \rho^N_t(x) = \partial_t \mathbb{E}_{\nu^N}[\eta_{tN^2}(x)] = \mathbb{E}_{\nu^N}[N^2 L_N \eta_{tN^2}(x)].$$

Logo, pelo Exemplo 3.1.1, pela linearidade da esperança e para $x \in \Lambda_N$ temos que

$$\begin{aligned}
\partial_t \rho^N_t(x) &= N^2(\mathbb{E}_{\nu^N}[\eta_{tN^2}(x-1)] - 2\mathbb{E}_{\nu^N}[\eta_{tN^2}(x)] + \mathbb{E}_{\nu^N}[\eta_{tN^2}(x+1)]) \\
&= N^2(\rho^N_t(x-1) - 2\rho^N_t(x) + \rho^N_t(x+1)) \\
&= \Delta_N \rho^N_t(x).
\end{aligned}$$

Então podemos resumir este resultado no seguinte lema.

Lema 3.5.2. *Se $\rho_t^N(x) = \mathbb{E}_{\nu^N}[\eta_{tN^2}(x)]$, então $\rho_t^N(x)$ é solução da equação semi-discreta do calor, isto é*

$$\begin{cases} \partial_s \rho_s^N(x) = (\Delta_N \rho_s^N)(x) & \textit{para} \quad x \in \Lambda_N, s \geq 0 \\ \rho_0^N(x) = \mathbb{E}_{\nu^N}[\eta_0(x)] & \textit{para} \quad x \in \Lambda_N \\ \rho_s^N(0) = \alpha, \ \rho_s^N(N) = \beta & \textit{para} \quad s \geq 0 \end{cases}, \tag{3.9}$$

onde Δ_N é o laplaciano discreto em Λ_N definido na equação (3.6).

Nota 3.5.3. *Se considerarmos a medida inicial $\nu_{\rho_0(\cdot)}$ da Definição 3.5.1, então definindo*

$$\rho_t^N(x) = \mathbb{E}_{\nu_{\rho_0(\cdot)}}[\eta_{tN^2}(x)],$$

temos que $\rho_t^N(x)$ satisfaz a equação (3.9), com condição inicial

$$\rho_0^N(x) = \mathbb{E}_{\nu_{\rho_0(\cdot)}}[\eta_{tN^2}(x)] = \rho_0\left(\frac{x}{N}\right).$$

Agora, seja $C = \{0, \cdots, N\}^2$ e consideremos o subconjunto

$$V = \{(x, y) \in C : 0 < x < y < N\}$$

e a sua fronteira $\partial V = \{(x, y) \in C : x = 0 \text{ ou } y = N\}$.

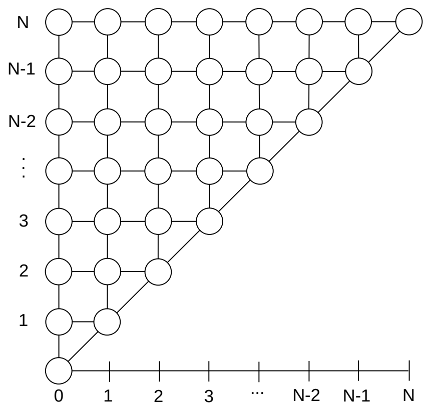


Figura 3.1: $V \cup \partial V$

Além disso, seja M o conjunto das funções $f : V \cup \partial V \to \mathbb{R}$ tais que $f|_{\partial V} = 0$.

Definição 3.5.4. *Dada ν^N uma medida de probabilidade em $\{0,1\}^{\Lambda_N}$, vamos definir para $(x, y) \in V \cup \partial V$ a função $\varphi_t^N(x, y)$ por*

$$\varphi_t^N(x, y) = \mathbb{E}_{\nu^N}\left[\{\eta_{tN^2}(x) - \rho_t^N(x)\}\{\eta_{tN^2}(y) - \rho_t^N(y)\}\right],$$

em V e $\varphi_t^N(x, y) = 0$ em ∂V.

Definição 3.5.5. *Denotemos por* Δ_N^V *o laplaciano discreto em* $V \cup \partial V$ *tal que* $\Delta_N^V : M \to \mathbb{R}$ *é definido por*

$(\Delta_V^N f)(x,y) \;=\; N^2\big\{f(x+1,y)+f(x-1,y)+f(x,y-1)+f(x,y+1)-4f(x,y)\big\}$ *se* $|x-y|>1$,

$$(\Delta_V^N f)(x,x+1) \;=\; N^2\big\{f(x-1,x+1)+f(x,x+2)-2f(x,x+1)\big\} ,$$

e $(\Delta_V^N f)(x,y)=0$ *se* $(x,y)\in\partial V$.

O laplaciano discreto introduzido acima é o gerador do passeio aleatório simétrico em $V \cup \partial V$, absorbido na fronteira ∂V. Assim temos o seguinte lema.

Lema 3.5.6. $\varphi_t^N(x,y)$ *definida em* $V\cup\partial V$ *é solução da equação*

$$\begin{cases} \partial_s\tilde\varphi_s(x,y) = \Delta_V^N\tilde\varphi_s(x,y) + g_s(x,y) & para \quad (x,y)\in V, \forall s\geq 0 \\ \tilde\varphi_0(x,y) = \varphi_0^N(x,y) & para \quad (x,y)\in V \\ \tilde\varphi_s(x,y) = 0 & para \quad (x,y)\in\partial V, \forall s\geq 0 \end{cases} , \tag{3.10}$$

onde $g_t(x,y) = -(\bigtriangledown_N\rho_t^N(x))^2\delta_{y=x+1}$ *e*

$$\bigtriangledown_N\rho_t^N(x) = N(\rho_t^N(x+1)-\rho_t^N(x)).$$

Demonstração. Para simplificar a notação, vamos considerar nesta prova $\eta_t := \eta_{tN^2}$.

Caso 1: $|x-y|>1$

Note que

$$\begin{aligned}\partial_t\varphi_t^N(x,y) &= \partial_t\mathbb{E}_{\nu^N}[\eta_t(x)\eta_t(y)] - \partial_t\left(\rho_t^N(x)\rho_t^N(y)\right) \\ &= \mathbb{E}_{\nu^N}\left[N^2L_N\left(\eta_t(x)\eta_t(y)\right)\right] - \left[\partial_t\left(\rho_t^N(x)\right)\rho_t^N(y) + \partial_t\left(\rho_t^N(y)\right)\rho_t^N(x)\right]\end{aligned}$$

Então, primeiro temos que

$$\begin{aligned}\partial_t\mathbb{E}_{\nu^N}[\eta_t(x)\eta_t(y)] &= \mathbb{E}_{\nu^N}\left[N^2\eta_t(1)\{\eta_t(y-1)+\eta_t(y+1)-2\eta_t(y)\}\right] \\ &\quad + \mathbb{E}_{\nu^N}\left[N^2\eta_t(y)\{\eta_t(x-1)+\eta_t(x+1)-2\eta_t(x)\}\right] \\ &= N^2\mathbb{E}_{\nu^N}\left[\eta_t(x)\eta_t(y-1)\right] + N^2\mathbb{E}_{\nu^N}\left[\eta_t(x)\eta_t(y+1)\right] \\ &\quad - 2N^2\mathbb{E}_{\nu^N}\left[\eta_t(x)\eta_t(y)\right] + N^2\mathbb{E}_{\nu^N}\left[\eta_t(x-1)\eta_t(y)\right] \\ &\quad + N^2\mathbb{E}_{\nu^N}\left[\eta_t(x+1)\eta_t(y)\right] - 2N^2\mathbb{E}_{\nu^N}\left[\eta_t(x)\eta_t(y)\right] \\ &= N^2\mathbb{E}_{\nu^N}\left[\eta_t(x)\eta_t(y-1)\right] + N^2\mathbb{E}_{\nu^N}\left[\eta_t(x)\eta_t(y+1)\right] \\ &\quad + N^2\mathbb{E}_{\nu^N}\left[\eta_t(x-1)\eta_t(y)\right] + N^2\mathbb{E}_{\nu^N}\left[\eta_t(x+1)\eta_t(y)\right] \\ &\quad - 4N^2\mathbb{E}_{\nu^N}\left[\eta_t(x)\eta_t(y)\right] \\ &= \Delta_V^N\left[\mathbb{E}_{\nu^N}[\eta_t(x)\eta_t(y)]\right].\end{aligned}$$

Segundo temos,

$$\begin{aligned}\partial_t\left(\rho_t^N(x)\right)\rho_t^N(y)+\partial_t\left(\rho_t^N(y)\right)\rho_t^N(x) &= \partial_t\mathbb{E}_{\nu^N}\left[\eta_t(x)\right]\rho_t^N(y)+\partial_t\mathbb{E}_{\nu^N}\left[\eta_t(y)\right]\rho_t^N(x)\\ &= N^2\partial_t\mathbb{E}_{\nu^N}\left[\eta_t(x-1)+\eta_t(x+1)\right.\\ &\quad \left.-2\eta_t(x)\right]\rho_t^N(y)\\ &\quad + N^2\partial_t\mathbb{E}_{\nu^N}\left[\eta_t(y-1)+\eta_t(y+1)\right.\\ &\quad \left.-2\eta_t(y)\right]\rho_t^N(x)\\ &= \Delta_V^N\left[\rho_t^N(x)\rho_t^N(y)\right].\end{aligned}$$

Agora, juntando estes dois resultados temos

$$\partial_t\varphi_t^N(x,y)=\Delta_V^N\varphi_t^N(x,y)+\underbrace{g(x,y)}_{=0}.$$

<u>Caso 2</u>: $|x-y|=1$
Note que

$$\begin{aligned}\partial_t\varphi_t^N(x,x+1) &= \partial_t\mathbb{E}_{\nu^N}[\eta_t(x)\eta_t(x+1)]-\partial_t\left(\rho_t^N(x)\rho_t^N(x+1)\right)\\ &= \mathbb{E}_{\nu^N}\left[N^2L_N\left(\eta_t(x)\eta_t(x+1)\right)\right]-\left[\partial_t\left(\rho_t^N(x)\right)\rho_t^N(x+1)\right.\\ &\quad \left.+\partial_t\left(\rho_t^N(x+1)\right)\rho_t^N(x)\right].\end{aligned}$$

Então, temos que

$$\begin{aligned}\partial_t\mathbb{E}_{\nu^N}[\eta_t(x)\eta_t(x+1)] &= \mathbb{E}_{\nu^N}\left[N^2\{\eta_t(x-1)\eta_t(x+1)+\eta_t(x)\eta_t(x+2)\right.\\ &\quad \left.-2\eta_t(x)\eta_t(x+1)\}\right]\\ &= \Delta_V^N\left[\mathbb{E}_{\nu^N}[\eta_t(x)\eta_t(x+1)]\right].\end{aligned}$$

Por outra parte,

$$\begin{aligned}\partial_t\left(\rho_t^N(x)\right)\rho_t^N(x+1)+\partial_t\left(\rho_t^N(x+1)\right)\rho_t^N(x) &= \partial_t\mathbb{E}_{\nu^N}\left[\eta_t(x)\right]\rho_t^N(x+1)\\ &\quad +\partial_t\mathbb{E}_{\nu^N}\left[\eta_t(x+1)\right]\rho_t^N(x)\\ &= N^2\partial_t\mathbb{E}_{\nu^N}\left[\eta_t(x-1)+\eta_t(x+1)\right.\\ &\quad \left.-2\eta_t(x+1)\right]\rho_t^N(x)\\ &= \Delta_V^N\left[\rho_t^N(x)\rho_t^N(x+1)\right]\\ &\quad +\left(\nabla\rho_t^N(x)\right)^2.\end{aligned}$$

Agora, juntado estes dois resultados temos

$$\partial_t\varphi_t^N(x,y)=\Delta_V^N\left[\varphi_t^N(x,y)\right]+g_t(x,y).$$

Resta analisar o que acontece na fronteira. Vamos considerar $x=0$, sendo os restantes casos análogos. Ora,

$$\partial_t \varphi_t^N(0,y) = \mathbb{E}_{\nu^N}[(\eta_t(0) - \rho_t^N(0))(\eta_t(y) - \rho_t^N(y))].$$

Como $\eta_t(0) = \alpha$ e $\rho_t^N(0) = \alpha$ para todo $t > 0$ resulta que $\varphi_t^N(0,y) = 0$. $\square$

Nota 3.5.7. *Consideremos a medida inicial $\nu_{\rho_0(\cdot)}$ como na Nota 3.5.3. Então, definimos*

$$\varphi_t^N(x,y) = \mathbb{E}_{\nu_{\rho_0(\cdot)}}\left[\{\eta_{tN^2}(x) - \rho_t^N(x)\}\{\eta_{tN^2}(y) - \rho_t^N(y)\}\right],$$

que também satisfaz (3.10)*, mas com condição inicial dada por*

$$\begin{aligned}
\varphi_0^N(x,y) &= \mathbb{E}_{\nu_{\rho_0(\cdot)}}\left[\{\eta_0(x) - \rho_0^N(x)\}\{\eta_0(y) - \rho_0^N(y)\}\right] \\
&= \mathbb{E}_{\nu_{\rho_0(\cdot)}}\left[\eta_0(x) - \rho_0^N(x)\right]\mathbb{E}_{\nu_{\rho_0(\cdot)}}\left[\eta_0(y) - \rho_0^N(y)\right] \\
&= 0.
\end{aligned}$$

Note que sempre que a medida inicial for uma medida produto esta condição inicial vai ser zero pois as variáveis aleatórias vão ser independentes de média zero.