Modelo em meios porosos em contato com reservatórios

Renato Ricardo de Paula

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro - PUC-Rio

Janeiro de 2017

Conteúdo

Introdução

- Analisar a evolução física de um gás ou um fluido evoluindo em um certo volume.

Introdução

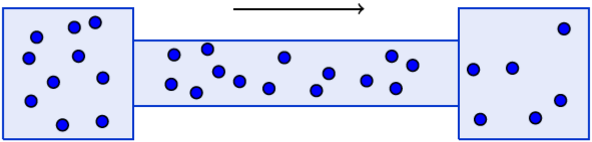
- Analisar a evolução física de um gás ou um fluido evoluindo em um certo volume.

- Escala macroscópica - descreve o movimento global do sistema físico.
- Escala microscópica - descreve o movimento das moléculas do sistema.

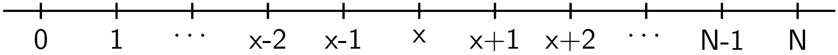
Introdução

- Analisar a evolução física de um gás ou um fluido evoluindo em um certo volume.

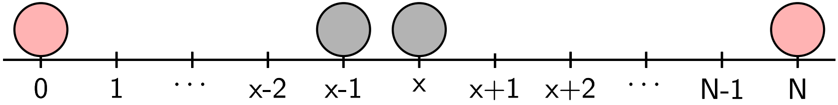
- Escala macroscópica - descreve o movimento global do sistema físico.
- Escala microscópica - descreve o movimento das moléculas do sistema.



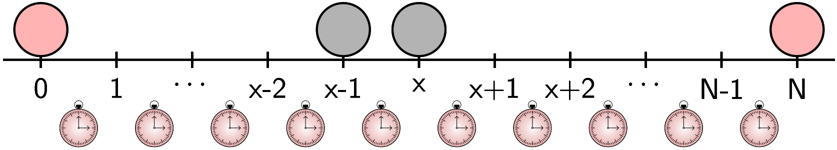
Dinâmica do processo



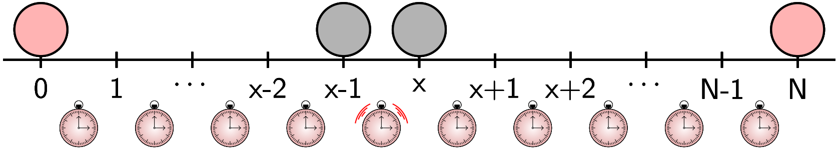
Dinâmica do processo



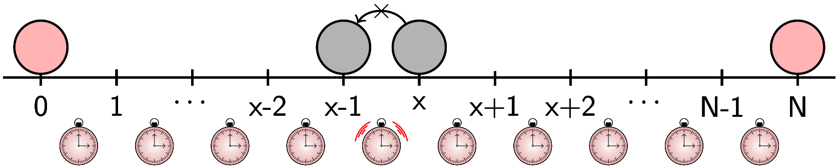
Dinâmica do processo



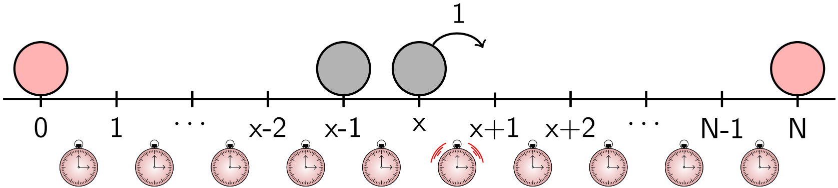
Dinâmica do processo



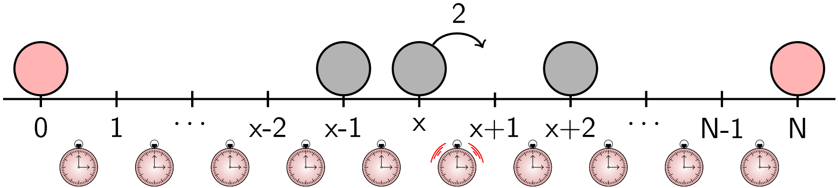
Dinâmica do processo



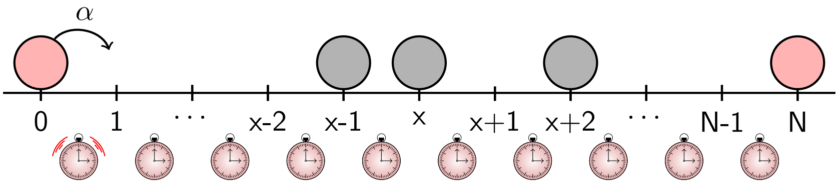
Dinâmica do processo



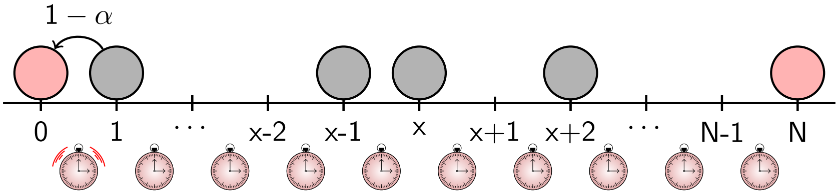
Dinâmica do processo



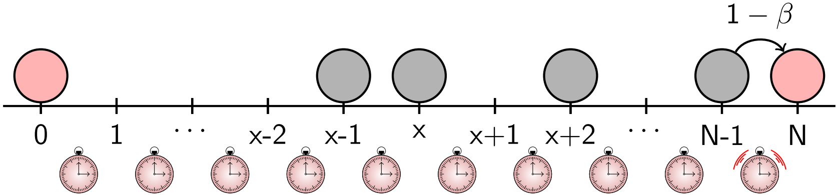
Dinâmica do processo



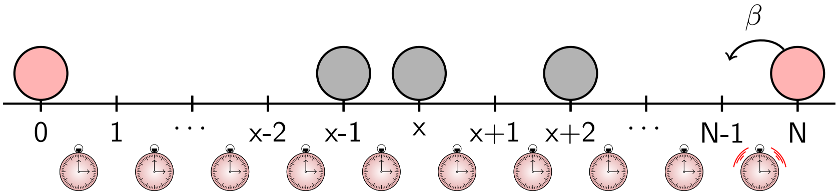
Dinâmica do processo



Dinâmica do processo



Dinâmica do processo



Gerador infinitesimal

- $\Sigma_N = \{1, 2, 3, \cdots, N-1\}$
- Espaço de estados $\{0,1\}^{\Sigma_N}$.
- Fixe $\alpha, \beta \in (0,1)$. Dada uma função $f : \{0,1\}^{\Sigma_N} \to \mathbb{R}$ o gerador infinitesimal para o PMM em contato com reservatórios é dado por

Gerador infinitesimal

- $\Sigma_N = \{1, 2, 3, \cdots, N-1\}$
- Espaço de estados $\{0,1\}^{\Sigma_N}$.
- Fixe $\alpha, \beta \in (0,1)$. Dada uma função $f : \{0,1\}^{\Sigma_N} \to \mathbb{R}$ o gerador infinitesimal para o PMM em contato com reservatórios é dado por

$$
\begin{aligned}
(L_{N,bulk} f)(\eta) = & \sum_{x=1}^{N-2} [\eta(x)(1-\eta(x+1)) + \eta(x+1)(1-\eta(x))] [\eta(x-1) \\
& + \eta(x+2)][f(\eta^{x,x+1}) - f(\eta)], \\
(L_{N,b} f)(\eta) = & [\alpha(1-\eta(1)) + (1-\alpha)\eta(1)][f(\eta^1) - f(\eta)] \\
& + [\beta(1-\eta(N-1)) + (1-\beta)\eta(N-1)][f(\eta^{N-1}) - f(\eta)]
\end{aligned}
$$

Gerador infinitesimal

- $\eta^{x,x+1}$ é a configuração obtida de η trocando os seus valores nos sítios x e $x+1$:

$$(\eta^{x,x+1})(y) = \begin{cases} \eta(x+1), & \text{se } \ y = x\,, \\ \eta(x), & \text{se } \ y = x+1\,, \\ \eta(y), & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Gerador infinitesimal

- $\eta^{x,x+1}$ é a configuração obtida de η trocando os seus valores nos sítios x e $x+1$:

$$(\eta^{x,x+1})(y) = \begin{cases} \eta(x+1), & \text{se } \ y = x\,, \\ \eta(x), & \text{se } \ y = x+1\,, \\ \eta(y), & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

- Para $x = 1$ ou $x = N-1$, η^x é a configuração obtida de η trocando o seu valor no sítio x, isto é

$$(\eta^{x})(y) = \begin{cases} 1-\eta(x), & \text{se } \ y = x\,, \\ \eta(y), & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Estado estacionário em equilíbrio $\alpha = \beta$

Definição

Seja $0 < \alpha < 1$. Chamamos de **medida Bernoulli produto** de parâmetro α à medida ν_α^N em $\{0,1\}^{\Sigma_N}$ tal que fixado $\eta \in \{0,1\}^{\Sigma_N}$, as variáveis aleatórias $\{\eta(x)\}_{x \in \Sigma_N}$ são independentes e

$$\nu_\alpha^N\{\eta \in \{0,1\}^{\Sigma_N} : \eta(x) = 1\} = \alpha.$$

Assim, para uma configuração η se tem

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

Proposição

Se $\alpha = \beta$ então ν_α^N é estacionária e reversível.

$$
\begin{array}{ccc}
\text{MICROSCÓPICO} & & \text{MACROSCÓPICO} \\
\Sigma_N = \{1, \cdots, N-1\} & & [0,1] \\
x & \longrightarrow & u = \frac{x}{N} \\
x = \lfloor Nu \rfloor & \longleftarrow & u
\end{array}
$$

Equação em meios porosos com condições de Dirichlet

Objetivo

Provar que quando $N \to \infty$ a densidade de partículas em $[0, 1]$ se comportará como a solução fraca da equação em meios porosos com condições de Dirichlet:

Equação em meios porosos com condições de Dirichlet

Objetivo

Provar que quando $N \to \infty$ a densidade de partículas em $[0,1]$ se comportará como a solução fraca da equação em meios porosos com condições de Dirichlet:

$$\begin{cases} \partial_t \rho(t,u) = \partial_u^2 \rho^2(t,u)\,, & \text{para } t > 0\,,\ u \in (0,1)\,, \\ \rho(t,0) = \alpha\,, & \text{para } t > 0\,, \\ \rho(t,1) = \beta\,, & \text{para } t > 0\,, \\ \rho(0,u) = \rho_0(u)\,, & u \in [0,1]\,, \end{cases}$$

onde ρ é função uma definida em $[0, T] \times [0,1]$ e que toma valores em $[0,1]$, e $\rho_0 : [0,1] \to [0,1]$ é uma função mensurável.

Heurística de como obter a equação hidrodinâmica

- $C^{1,2}([0,T]\times[0,1])$ - conjunto das funções $H:[0,T]\times[0,1]\to\mathbb{R}$ tais que H é de classe C^1 no tempo e de classe C^2 no espaço.

Heurística de como obter a equação hidrodinâmica

- $C^{1,2}([0,T]\times[0,1])$ - conjunto das funções $H:[0,T]\times[0,1]\to\mathbb{R}$ tais que H é de classe C^1 no tempo e de classe C^2 no espaço.
- $C_0^{1,2}([0,T]\times[0,1])$ - subconjunto das funções $H\in C^{1,2}([0,T]\times[0,1])$ tal que $H(t,0)=H(t,1)=0$ para todo $t\in[0,T]$.

Heurística de como obter a equação hidrodinâmica

- $C^{1,2}([0,T]\times[0,1])$ - conjunto das funções $H:[0,T]\times[0,1]\to\mathbb{R}$ tais que H é de classe C^1 no tempo e de classe C^2 no espaço.
- $C_0^{1,2}([0,T]\times[0,1])$ - subconjunto das funções $H\in C^{1,2}([0,T]\times[0,1])$ tal que $H(t,0)=H(t,1)=0$ para todo $t\in[0,T]$.

Definição

Para cada configuração $\eta\in\{0,1\}^{\Sigma_N}$ definimos a **medida empírica** $\pi^N(\eta,du)$ em $[0,1]$ como

$$\pi^N(\eta,du)=\frac{1}{N}\sum_{x\in\Sigma_N}\eta(x)\delta_{\frac{x}{N}}(du).$$

Heurística de como obter a equação hidrodinâmica

- Analisar a evolução temporal da medida empírica associada ao processo $\{\eta_t\}_{t\geq 0}$.

Heurística de como obter a equação hidrodinâmica

- Analisar a evolução temporal da medida empírica associada ao processo $\{\eta_t\}_{t\geq 0}$.
- Definimos o processo de medidas empíricas como $\pi_t^N(\eta, du) = \pi^N(\eta_{tN^2}, du)$.

Heurística de como obter a equação hidrodinâmica

- Analisar a evolução temporal da medida empírica associada ao processo $\{\eta_t\}_{t\geq 0}$.
- Definimos o processo de medidas empíricas como $\pi_t^N(\eta, du) = \pi^N(\eta_{tN^2}, du)$.
- Se $H \in C_0^{1,2}([0,T] \times [0,1])$, então a integral de H com respeito à medida empírica π_t^N será dada por

$$\langle \pi_t^N, H \rangle := \int H(u)\pi_t^N(\eta, du) = \frac{1}{N}\sum_{x=1}^{N-1} H_x \eta_{tN^2}(x),$$

onde $H_x = H(\frac{x}{N})$.

Heurística de como obter a equação hidrodinâmica

Definição

O **laplaciano discreto** de H em $\frac{x}{N}$ com $x \in \Sigma_N$ é dado por

$$\Delta_N H_x = N^2\{H_{x-1} - 2H_x + H_{x+1}\}.$$

Definimos também os **gradientes discretos** como

$$\begin{aligned} \nabla_N^+ H_x &= N(H_{x+1} - H_x), \\ \nabla_N^- H_x &= -N(H_{x-1} - H_x). \end{aligned}$$

Heurística de como obter a equação hidrodinâmica

$$N^2 L_N \langle \pi_t^N, H \rangle = \frac{1}{N} \sum_{x=1}^{N-1} \Delta_N H_x \varphi_x(\eta_{tN^2}) + c_1(t, H) + c_{N-1}(t, H),$$

onde

Heurística de como obter a equação hidrodinâmica

$$N^2 L_N\langle \pi_t^N, H\rangle = \frac{1}{N}\sum_{x=1}^{N-1}\Delta_N H_x \varphi_x(\eta_{tN^2}) + c_1(t,H) + c_{N-1}(t,H),$$

onde

$$c_1(t,H) = \nabla_N^+ H_0\big(\alpha - \eta_{tN^2}(1) + \alpha\eta_{tN^2}(1) + \eta_{tN^2}(1)\eta_{tN^2}(2) - \alpha\eta_{tN^2}(2)\big)$$

$$\begin{aligned} c_{N-1}(t,H) = & -\nabla_N^- H_N\big(\beta - \eta_{tN^2}(N-1) + \eta_{tN^2}(N-2)\eta_{tN^2}(N-1) \\ & + \eta_{tN^2}(N-1)\beta - \eta_{tN^2}(N-2)\beta\big), \end{aligned}$$

e

Heurística de como obter a equação hidrodinâmica

$$N^2 L_N \langle \pi_t^N, H \rangle = \frac{1}{N} \sum_{x=1}^{N-1} \Delta_N H_x \varphi_x(\eta_{tN^2}) + c_1(t,H) + c_{N-1}(t,H),$$

onde

$$c_1(t,H) = \nabla_N^+ H_0 \big(\alpha - \eta_{tN^2}(1) + \alpha\eta_{tN^2}(1) + \eta_{tN^2}(1)\eta_{tN^2}(2) - \alpha\eta_{tN^2}(2)\big)$$

$$\begin{aligned} c_{N-1}(t,H) = & -\nabla_N^- H_N \big(\beta - \eta_{tN^2}(N-1) + \eta_{tN^2}(N-2)\eta_{tN^2}(N-1) \\ & + \eta_{tN^2}(N-1)\beta - \eta_{tN^2}(N-2)\beta\big), \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \varphi_x(\eta_{tN^2}) = & \ \eta_{tN^2}(x-1)\eta_{tN^2}(x) + \eta_{tN^2}(x)\eta_{tN^2}(x+1) \\ & - \eta_{tN^2}(x-1)\eta_{tN^2}(x+1). \end{aligned}$$

Heurística de como obter a equação hidrodinâmica

- Fixe $H \in C_0^{1,2}([0, T] \times [0,1])$.

Heurística de como obter a equação hidrodinâmica

- Fixe $H \in C_0^{1,2}([0,T] \times [0,1])$.
- Pela fórmula de Dynkin, tomando a função $F(t,\eta_t) = \langle \pi_t^N, H \rangle = \frac{1}{N} \sum_{x=1}^{N-1} H_x \eta_{tN^2}(x)$, temos que

$$M_t^N(H) = \langle \pi_t^N, H \rangle - \langle \pi_0^N, H \rangle - \int_0^t (\partial_s + N^2 L_N) \langle \pi_s^N, H \rangle ds,$$

é um martingal com respeito à filtração natural $\mathcal{F}_t := \sigma(\eta_s : s \leq t)$.

Heurística de como obter a equação hidrodinâmica

- Fixe $H \in C_0^{1,2}([0,T] \times [0,1])$.
- Pela fórmula de Dynkin, tomando a função $F(t,\eta_t) = \langle \pi_t^N, H \rangle = \frac{1}{N}\sum_{x=1}^{N-1} H_x \eta_{tN^2}(x)$, temos que

$$M_t^N(H) = \langle \pi_t^N, H \rangle - \langle \pi_0^N, H \rangle - \int_0^t (\partial_s + N^2 L_N) \langle \pi_s^N, H \rangle ds,$$

  é um martingal com respeito à filtração natural $\mathcal{F}_t := \sigma(\eta_s : s \leq t)$.
- Como $F(s,\cdot)$ não depende do tempo, então $\partial_s F(s,\cdot) = 0$. Logo,

$$M_t^N(H) = \langle \pi_t^N, H \rangle - \langle \pi_0^N, H \rangle - \int_0^t \frac{1}{N} \sum_{x=1}^{N-1} \Delta_N H_x \varphi_x(\eta_{sN^2}) ds$$
$$+ \int_0^t c_1(s,H) + c_{N-1}(s,H) ds.$$

Heurística de como obter a equação hidrodinâmica

Hipótese

Sendo μ_N uma medida qualquer, assumimos que podemos trocar $\eta_{sN^2}(1)$ (resp. $\eta_{sN^2}(N-1)$) por α (resp. β) com um certo erro e_1 (resp. e_{N-1}), que é negligível quando $N \to \infty$.

Heurística de como obter a equação hidrodinâmica

Hipótese

Sendo μ_N uma medida qualquer, assumimos que podemos trocar $\eta_{sN^2}(1)$ (resp. $\eta_{sN^2}(N-1)$) por α (resp. β) com um certo erro e_1 (resp. e_{N-1}), que é negligível quando $N \to \infty$.

Logo

$$\begin{aligned} M_t^N(H) &= \frac{1}{N}\sum_{x=1}^{N-1} H_x \eta_{tN^2}(x) - \frac{1}{N}\sum_{x=1}^{N-1} H_x \eta_0(x) \\ &- \int_0^t \frac{1}{N}\sum_{x=1}^{N-1} \Delta_N H_x \varphi_x(\eta_{sN^2}) ds \\ &+ \int_0^t \nabla_N^+ H_0 \alpha^2 \; ds + e_1 - \int_0^t \nabla_N^- H_N \beta^2 \; ds + e_{N-1}. \end{aligned}$$

Heurística de como obter a equação hidrodinâmica

- Como $M_0^N(H) = 0$ e a esperança com respeito a uma medida qualquer μ_N de um martingal é constante, então $\mathbb{E}_{\mu_N}[M_t^N(H)] = \mathbb{E}_{\mu_N}[M_0^N(H)] = 0$,

- Como $M_0^N(H) = 0$ e a esperança com respeito a uma medida qualquer μ_N de um martingal é constante, então $\mathbb{E}_{\mu_N}[M_t^N(H)] = \mathbb{E}_{\mu_N}[M_0^N(H)] = 0$,

$$
\begin{aligned}
0 = & \frac{1}{N}\sum_{x=1}^{N-1} H_x\big(\mathbb{E}_{\mu_N}[\eta_{tN^2}(x)] - \mathbb{E}_{\mu_N}[\eta_0(x)]\big) \\
& - \int_0^t \frac{1}{N}\sum_{x=1}^{N-1} \Delta_N H_x \mathbb{E}_{\mu_N}[\varphi_x(\eta_{sN^2})] ds \\
& + \int_0^t \nabla_N^+ H_0 \alpha^2 \; ds - \int_0^t \nabla_N^- H_N \beta^2 \; ds + \mathbb{E}_{\mu_N}[e_1] + \mathbb{E}_{\mu_N}[e_{N-1}],
\end{aligned}
$$

Heurística de como obter a equação hidrodinâmica

- Seja ρ_t um perfil de densidade o qual queremos provar que é solução da equação diferencial parcial que procuramos.

Heurística de como obter a equação hidrodinâmica

- Seja ρ_t um perfil de densidade o qual queremos provar que é solução da equação diferencial parcial que procuramos.
- Seja $\rho_t^N(x) = \mathbb{E}_{\mu_N}[\eta_{tN^2}(x)]$.

Heurística de como obter a equação hidrodinâmica

- Seja ρ_t um perfil de densidade o qual queremos provar que é solução da equação diferencial parcial que procuramos.
- Seja $\rho_t^N(x) = \mathbb{E}_{\mu_N}[\eta_{tN^2}(x)]$.
- Supomos que $\rho_t^N(x) \sim \rho_t(\frac{x}{N})$.

Heurística de como obter a equação hidrodinâmica

- Seja ρ_t um perfil de densidade o qual queremos provar que é solução da equação diferencial parcial que procuramos.
- Seja $\rho_t^N(x) = \mathbb{E}_{\mu_N}[\eta_{tN^2}(x)]$.
- Supomos que $\rho_t^N(x) \sim \rho_t(\frac{x}{N})$.
- Assumindo que a esperança do produto é o produto da esperança, e que $\rho_t(\frac{x\pm 1}{N}) \sim \rho_t(\frac{x}{N})$, podemos escrever para cada $x \in \Sigma_N$

$$\mathbb{E}_{\mu_N}[\varphi_x(\eta_{tN^2})] \sim \rho_t(\tfrac{x}{N})^2.$$

Heurística de como obter a equação hidrodinâmica

- Portanto,

$$0 = \frac{1}{N}\sum_{x=1}^{N-1} H_x\big(\rho_t(\tfrac{x}{N}) - \rho_0(\tfrac{x}{N})\big) - \int_0^t \tfrac{1}{N}\sum_{x=1}^{N-1} \Delta_N H_x\left(\rho_s^2(\tfrac{x}{N})\right) ds$$
$$- \int_0^t \nabla_N^- H_N \beta^2 ds + \int_0^t \nabla_N^+ H_0 \alpha^2 ds + \mathbb{E}_{\mu_N}[e_1] + \mathbb{E}_{\mu_N}[e_{N-1}].$$

- Fazendo $N \to \infty$ e usando o fato de que a esperança de e_1 e e_{N-1} são negligíveis, temos

Heurística de como obter a equação hidrodinâmica

- Portanto,

$$0 = \frac{1}{N}\sum_{x=1}^{N-1} H_x\big(\rho_t(\tfrac{x}{N}) - \rho_0(\tfrac{x}{N})\big) - \int_0^t \tfrac{1}{N}\sum_{x=1}^{N-1} \Delta_N H_x\left(\rho_s^2(\tfrac{x}{N})\right) ds$$
$$- \int_0^t \nabla_N^- H_N \beta^2 ds + \int_0^t \nabla_N^+ H_0 \alpha^2 ds + \mathbb{E}_{\mu_N}[e_1] + \mathbb{E}_{\mu_N}[e_{N-1}].$$

- Fazendo $N \to \infty$ e usando o fato de que a esperança de e_1 e e_{N-1} são negligíveis, temos

$$0 = \int_0^1 (\rho_t(u) - \rho_0(u))H(u)du - \int_0^t \int_0^1 \Delta_N H(u)(\rho_s(u))^2 duds$$
$$- \int_0^t \partial_u H(1)\beta^2 - \partial_u H(0)\alpha^2 ds.$$

- Portanto,

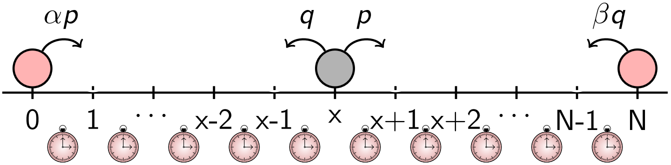
$$0 = \frac{1}{N}\sum_{x=1}^{N-1} H_x\big(\rho_t(\tfrac{x}{N}) - \rho_0(\tfrac{x}{N})\big) - \int_0^t \tfrac{1}{N}\sum_{x=1}^{N-1} \Delta_N H_x\left(\rho_s^2(\tfrac{x}{N})\right) ds$$
$$- \int_0^t \nabla_N^- H_N \beta^2 ds + \int_0^t \nabla_N^+ H_0 \alpha^2 ds + \mathbb{E}_{\mu_N}[e_1] + \mathbb{E}_{\mu_N}[e_{N-1}].$$

- Fazendo $N \to \infty$ e usando o fato de que a esperança de e_1 e e_{N-1} são negligíveis, temos

$$0 = \int_0^1 (\rho_t(u) - \rho_0(u))H(u)du - \int_0^t \int_0^1 \Delta_N H(u)(\rho_s(u))^2 duds$$
$$- \int_0^t \partial_u H(1)\beta^2 - \partial_u H(0)\alpha^2 ds.$$

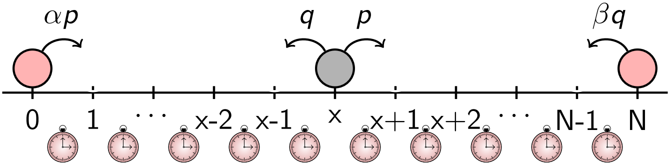
- A equação acima é a noção integral da solução fraca da equação em meios porosos com condições de Dirichlet.

MATRIZ ANSATZ



A chave para obtermos informações sobre o estado estacionário do processo de exclusão simples assimétrico (ASEP) é a **Representação em Produto Matricial** das probabilidades estacionárias. O peso de uma configuração η é dado por:

Matriz Ansatz para o ASEP



A chave para obtermos informações sobre o estado estacionário do processo de exclusão simples assimétrico (ASEP) é a **Representação em Produto Matricial** das probabilidades estacionárias. O peso de uma configuração η é dado por:

$$\mathbb{P}(\eta) = \frac{1}{Z_{N-1}} \mathbf{w}^T \prod_{x=1}^{N-1} (\eta(x) D + (1 - \eta(x)) E) \mathbf{v}$$

onde $\eta(x) = 1$ (ou 0) se o sítio x está ocupado (ou vazio) e a constante de normalização é $Z_{N-1} = \mathbf{w}^T (D + E)^{N-1} \mathbf{v}$. Esta estrutura combinatória será codificada na álgebra gerada por $D, E, \mathbf{w}^T$ e $\mathbf{v}$.

Álgebra de Matrizes para o ASEP

O método da matriz ansatz permite representar os pesos no estado estacionário se os operadores D e E, e os vetores $\mathbf{w}^T$ e $\mathbf{v}$ satisfizerem

Álgebra de matrizes

$$\begin{aligned} pDE - qED &= D + E, && \text{(1a)} \\ \mathbf{w}^T[\alpha pE - (1-\alpha)qD] &= \mathbf{w}^T, && \text{(1b)} \\ [(1-\beta)pD - \beta qE]\mathbf{v} &= \mathbf{v}. && \text{(1c)} \end{aligned}$$

(B. Derrida, M. R. Evans, V. Hakin e V. Pasquier, 1993)
A Matriz Ansatz nos permite calcular muitas **propriedades do estado estacionário** como a densidade de partículas, a média da corrente, funções de correlação... (veja o review de R. Blythe e M. R. Evans, 2007).

Teorema

Considere o ASEP em $\{1, \cdots, N-1\}$ com taxas das fronteiras $\alpha, \beta \in [0,1]$ e taxas p, q no bulk. Suponha que as matrizes D, E e os vetores $\mathbf{w}^T, \mathbf{v}$ satisfazem a álgebra de matrizes (1). Se para toda configuração $\eta \in \{0,1\}^{\Sigma_N}$ a função

$$f_{N-1}(\eta(1), \eta(2), \cdots, \eta(N-1)) = \mathbf{w}^T \prod_{x=1}^{N-1} (\eta(x) D + (1 - \eta(x)) E) \mathbf{v},$$

estiver bem definida em $\mathbb{R}^+$ e a normalização

$$Z_{N-1} = \sum_{\eta \in \{0,1\}^{\Sigma_N}} f_{N-1}(\eta) \neq 0,$$

então a medida estacionária do ASEP será dada por

$$\mu_{ss}(\eta) = \frac{f_{N-1}(\eta)}{Z_{N-1}}.$$

Ideia da demonstração

- Seja $W(\eta, \xi)$ a taxa na qual o ASEP muda de uma configuração η para uma configuração ξ,

Ideia da demonstração

- Seja $W(\eta, \xi)$ a taxa na qual o ASEP muda de uma configuração η para uma configuração ξ,
- $$W(\eta, \eta^{x,x+1}) = \begin{cases} p\,, & \text{se } \eta(x) = 1\,,\, \eta(x+1) = 0\,, \\ q\,, & \text{se } \eta(x) = 0\,,\, \eta(x+1) = 1, \end{cases}$$

  para $1 \leq x \leq N - 2$.

Ideia da demonstração

- Seja $W(\eta, \xi)$ a taxa na qual o ASEP muda de uma configuração η para uma configuração ξ,
- $$W(\eta, \eta^{x,x+1}) = \begin{cases} p\,, & \text{se } \eta(x) = 1\,,\ \eta(x+1) = 0\,, \\ q\,, & \text{se } \eta(x) = 0\,,\ \eta(x+1) = 1, \end{cases}$$

  para $1 \leq x \leq N-2$.
- $$W(\eta, \eta^{1}) = \begin{cases} \alpha p\,, & \text{se } \eta(1) = 0\,, \\ (1-\alpha) q\,, & \text{se } \eta(1) = 1. \end{cases}$$

Ideia da demonstração

- Seja $W(\eta,\xi)$ a taxa na qual o ASEP muda de uma configuração η para uma configuração ξ,
- $$W(\eta,\eta^{x,x+1}) = \begin{cases} p\,, & \text{se } \eta(x)=1\,,\ \eta(x+1)=0\,,\\ q\,, & \text{se } \eta(x)=0\,,\ \eta(x+1)=1, \end{cases}$$
  para $1 \leq x \leq N-2$.
- $$W(\eta,\eta^{1}) = \begin{cases} \alpha p\,, & \text{se } \eta(1)=0\,,\\ (1-\alpha)q\,, & \text{se } \eta(1)=1. \end{cases}$$
- $$W(\eta,\eta^{N-1}) = \begin{cases} \beta q\,, & \text{se } \eta(N-1)=0\,,\\ (1-\beta)p\,, & \text{se } \eta(N-1)=1, \end{cases}$$
  e $W(\eta,\xi)=0$ caso contrário.

Ideia da demonstração

- Como $\{\eta_t\}_{t\geq 0}$ é uma cadeia de Markov irredutível com espaço de estados finito, ela possui uma única medida estacionária μ_{ss}, dada pela solução estacionária da master equation

$$\frac{d}{dt}\mu_{ss}(\eta) = 0 = \sum_{\xi\in\{0,1\}^{\Sigma_N}} \mu_{ss}(\xi)W(\xi,\eta) - \mu_{ss}(\eta)W(\eta,\xi).$$

para todo $\eta \in \{0,1\}^{\Sigma_N}$.

Ideia da demonstração

- Como $\{\eta_t\}_{t\geq 0}$ é uma cadeia de Markov irredutível com espaço de estados finito, ela possui uma única medida estacionária μ_{ss}, dada pela solução estacionária da master equation

$$\frac{d}{dt}\mu_{ss}(\eta) = 0 = \sum_{\xi\in\{0,1\}^{\Sigma_N}} \mu_{ss}(\xi)W(\xi,\eta) - \mu_{ss}(\eta)W(\eta,\xi).$$

  para todo $\eta \in \{0,1\}^{\Sigma_N}$.
- Temos que f_{N-1} satisfaz a equação acima.

Ideia da demonstração

- Como $\{\eta_t\}_{t\geq 0}$ é uma cadeia de Markov irredutível com espaço de estados finito, ela possui uma única medida estacionária μ_{ss}, dada pela solução estacionária da master equation

$$\frac{d}{dt}\mu_{ss}(\eta) = 0 = \sum_{\xi \in \{0,1\}^{\Sigma_N}} \mu_{ss}(\xi)W(\xi,\eta) - \mu_{ss}(\eta)W(\eta,\xi).$$

  para todo $\eta \in \{0,1\}^{\Sigma_N}$.
- Temos que f_{N-1} satisfaz a equação acima.
- Os termos individuais são da forma

$$f_{N-1}(\eta^{x,x+1})W(\eta^{x,x+1},\eta) - f_{N-1}(\eta)W(\eta,\eta^{x,x+1}).$$

Ideia da demonstração

Usando a álgebra de matrizes podemos simplificar os termos como

$\eta(x) = 1$ e $\eta(x+1) = 0$

$$
\begin{aligned}
& f_{N-1}(\cdots, \eta(x-1), 0, 1, \eta(x+2)\cdots)q \\
& - f_{N-1}(\cdots, \eta(x-1), 1, 0, \eta(x+2)\cdots)p \\
& = \mathbf{w}^T \cdots X_{\eta(x-1)} \underbrace{[qED - pDE]}_{=-(D+E)} X_{\eta(x+2)} \cdots \mathbf{v} \\
& = -\mathbf{w}^T \cdots X_{\eta(x-1)}[D]X_{\eta(x+2)} \cdots \mathbf{v} - \mathbf{w}^T \cdots X_{\eta(x-1)}[E]X_{\eta(x+2)} \cdots \mathbf{v} \\
& = -f_{N-2}(\cdots, \eta(x-1), 1, \eta(x+2)\cdots) \\
& - f_{N-2}(\cdots, \eta(x-1), 0, \eta(x+2), \cdots).
\end{aligned}
$$

Ideia da demonstração

Assim, podemos escrever os termos individuais para o bulk como

$$
\begin{aligned}
& f_{N-1}(\eta^{x,x+1})W(\eta^{x,x+1},\eta) - f_{N-1}(\eta)W(\eta,\eta^{x,x+1}) \\
=& (1-2\eta(x))f_{N-2}(\cdots,\eta(x-1),\eta(x),\eta(x+2),\cdots) \\
=& -(1-2\eta(x+1))f_{N-2}(\cdots,\eta(x-1),\eta(x+1),\eta(x+2),\cdots).
\end{aligned}
$$

Ideia da demonstração

Para a fronteira esquerda temos

Para $\eta(1) = 1$

$$\begin{aligned}
\alpha p f_{N-1}(0,\cdots) - (1-\alpha) q f_{N-1}(1,\cdots) &= \mathbf{w}^T[\alpha p E]\cdots\mathbf{v} \\
&- \mathbf{w}^T[(1-\alpha)qD]\cdots\mathbf{v} \\
&= \underbrace{\mathbf{w}^T[\alpha p E - (1-\alpha)qD]}_{=\mathbf{w}^T}\cdots\mathbf{v} \\
&= \mathbf{w}^T \underbrace{\cdots}_{\text{N-2 termos}} \mathbf{v} \\
&= f_{N-2}(\eta(2),\cdots).
\end{aligned}$$

Ideia da demonstração

Para a fronteira esquerda temos

Para $\eta(1) = 1$

$$
\begin{aligned}
\alpha p f_{N-1}(0,\cdots) - (1-\alpha) q f_{N-1}(1,\cdots) &= \mathbf{w}^T [\alpha p E] \cdots \mathbf{v} \\
&- \mathbf{w}^T [(1-\alpha) q D] \cdots \mathbf{v} \\
&= \underbrace{\mathbf{w}^T [\alpha p E - (1-\alpha) q D]}_{=\mathbf{w}^T} \cdots \mathbf{v} \\
&= \mathbf{w}^T \quad \underbrace{\cdots}_{\text{N-2 termos}} \quad \mathbf{v} \\
&= f_{N-2}(\eta(2),\cdots).
\end{aligned}
$$

Assim,

$$
\begin{aligned}
& f_{N-1}(\eta^1) W(\eta^1,\eta) - f_{N-1}(\eta) W(\eta,\eta^1) \\
= & -(1-\eta(1)) f_{N-2}(\eta(2),\cdots)
\end{aligned}
$$

Ideia da demonstração

Para a fronteira direita temos

$$
\begin{aligned}
&f_{N-1}(\eta^{N-1})W(\eta^{N-1},\eta) - f_{N-1}(\eta)W(\eta,\eta^{N-1})\\
=&(1-2\eta(N-1))f_{N-2}(\cdots,\eta(N-2)).
\end{aligned}
$$

Ideia da demonstração

Para a fronteira direita temos

$$\begin{aligned}&f_{N-1}(\eta^{N-1})W(\eta^{N-1},\eta)-f_{N-1}(\eta)W(\eta,\eta^{N-1})\\=&(1-2\eta(N-1))f_{N-2}(\cdots,\eta(N-2)).\end{aligned}$$

Como soma dos termos individuais no bulk é telescópica, sobram dois termos referentes a $x=1$ e $x=N-2$, os quais se cancelam com as taxas das fronteiras, mostrando assim que μ_{ss} é medida estacionária para o ASEP, como queríamos.

Corrente microscópica

Definição

Dada uma configuração $\eta \in \{0,1\}^{\Sigma_N}$, definimos a **corrente microscópica** associada ao elo $\{x, x+1\}$ (representada por $j_{x,x+1}(\eta)$) como sendo a diferença entre a taxa de salto do sítio x para o sítio $x+1$ e a taxa de salto do sítio $x+1$ para o sítio x.

Corrente microscópica para o ASEP

$$j_{x,x+1}(\eta) = p\eta(x)(1-\eta(x+1)) - q\eta(x+1)(1-\eta(x)).$$

Lema

Se μ é uma medida estacionária em $\{0,1\}^{\Sigma_N}$, então $\int L_N f(\eta) d\mu = 0$ para qualquer $f : \{0,1\}^{\Sigma_N} \to \mathbb{R}$. Assim, tomando $f_x : \{0,1\}^{\Sigma_N} \to \mathbb{R}$ onde $f_x(\eta) = \eta(x)$, temos que

$$\int L_N f_x(\eta) d\mu = \int (j_{x-1,x}(\eta) - j_{x,x+1}(\eta)) d\mu = 0$$

para $x \in \Sigma_N$. Logo, para $x \in \Sigma_N$,

$$\int j_{x-1,x}(\eta) d\mu = \int j_{x,x+1}(\eta) d\mu,$$

isto é, no estado estacionário a corrente média no bulk e nas fronteiras é constante.

Encontrando a álgebra de matrizes

Por exemplo, a corrente média com respeito a medida estacionária μ para o ASEP em contato com reservatórios são dadas por

$$\underbrace{\frac{\mathbf{w}^T[\alpha p E - (1-\alpha) q D] C^{N-2} \mathbf{v}}{Z_{N-1}}}_{\text{fronteira esquerda}} = \underbrace{\frac{\mathbf{w}^T C^{x-1}(pDE - qED) C^{(N-1)-(x+1)} \mathbf{v}}{Z_{N-1}}}_{\text{bulk}}$$

$$= \underbrace{\frac{\mathbf{w}^T C^{N-2}[(1-\beta) p D - \beta q E -] \mathbf{v}}{Z_{N-1}}}_{\text{fronteira direita}}.$$

Proposição

Suponha que $D, E, \mathbf{w}^T$ e $\mathbf{v}$ satisfazem a álgebra de matrizes para o ASEP e que f_{N-1} definida anteriormente é estritamente positiva.

(a) Se D e E comutam, então

Propriedade das matrizes

Proposição

Suponha que $D, E, \mathbf{w}^T$ e $\mathbf{v}$ satisfazem a álgebra de matrizes para o ASEP e que f_{N-1} definida anteriormente é estritamente positiva.

(a) Se D e E comutam, então

(i) $\alpha = \beta$,

Propriedade das matrizes

Proposição

Suponha que $D, E, \mathbf{w}^T$ e $\mathbf{v}$ satisfazem a álgebra de matrizes para o ASEP e que f_{N-1} definida anteriormente é estritamente positiva.

(a) Se D e E comutam, então

(i) $\alpha = \beta$,

(ii) $p = 1$ e $\alpha = 0$, ou $p = 1$ e $\beta = 1$,

Propriedade das matrizes

Proposição

Suponha que $D, E, \mathbf{w}^T$ e $\mathbf{v}$ satisfazem a álgebra de matrizes para o ASEP e que f_{N-1} definida anteriormente é estritamente positiva.

(a) Se D e E comutam, então

(i) $\alpha = \beta$,

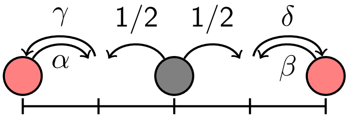
(ii) $p = 1$ e $\alpha = 0$, ou $p = 1$ e $\beta = 1$,

(iii) $p = 0$ e $\alpha = 1$, ou $p = 0$ e $\beta = 0$.
No caso (i), a única medida estacionária é ν_α^N (Bernoulli produto), enquanto que nos casos (ii) e (iii), as medidas estacionários concentram-se em configurações da forma $\cdots 00001111 \cdots$ (no caso (ii)) ou $\cdots 111000 \cdots$ (no caso (iii)).

(b) Se $p = 1$ e D e E não comutam, então as matrizes são necessariamente de dimensão infinita.

Normalização

Fazendo $p = q = \frac{1}{2}$, ou seja, no SSEP



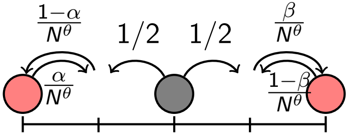
Assim, a expressão para a normalização Z_{N-1} é dada por

B. Derrida, J. L. Lebowitz, E. R. Speer, 2002

$$Z_{N-1} = \frac{1}{(\rho_a - \rho_b)^{N-1}} \frac{\Gamma(N - 1 + \frac{1}{\alpha+\gamma} + \frac{1}{\beta+\delta})}{\Gamma(\frac{1}{\alpha+\gamma} + \frac{1}{\beta+\delta})},$$

onde $\rho_a = \frac{\alpha}{\alpha+\gamma}$, $\rho_b = \frac{\delta}{\beta+\delta}$ e $\Gamma(z)$ é a função Gama usual dada por $\Gamma(z+1) = z!$ para z sendo um número inteiro positivo, e $\Gamma(z) = \int_0^\infty x^{z-1} e^{-x} dx$ para qualquer $z \in \mathbb{C}$ com $Re(z) > 0$.

SSEP em contato com reservatórios lentos



Normalização

$$Z_{N-1} = \frac{1}{(\alpha-\beta)^{N-1}} \frac{\Gamma(2N^\theta + N - 1)}{\Gamma(2N^\theta)}.$$

SSEP em contato com reservatórios lentos

Álgebra de matrizes

$$DE - ED = D + E, \qquad \mathbf{w}^T \left[\frac{\alpha}{N^\theta} E - \frac{1-\alpha}{N^\theta} D \right] = \mathbf{w}^T,$$

$$\left[\frac{1-\beta}{N^\theta} D - \frac{\beta}{N^\theta} E \right] \mathbf{v} = \mathbf{v}.$$

Propriedades

$$C(D + I) = DC \qquad \text{e} \qquad CD = (D - I)C.$$

Densidade de partículas

$$
\begin{aligned}
\langle \eta(x) \rangle_{\mu_{ss}}^{N-1} &= \frac{\mathbf{w}^T C^{x-1} \overbrace{D C^{N-1-x}} \mathbf{v}}{Z_{N-1}} \\
&= \frac{\mathbf{w}^T C^{x-1} C(D+I) C^{N-2-x} \mathbf{v}}{Z_{N-1}} \\
&= \frac{\mathbf{w}^T C^{x} \overbrace{D C^{N-2-x}} \mathbf{v}}{Z_{N-1}} + \frac{\mathbf{w}^T C^{N-2} \mathbf{v}}{Z_{N-1}} \\
&= \frac{\mathbf{w}^T C^{x+1} D C^{N-3-x} \mathbf{v}}{Z_{N-1}} + 2 \frac{\mathbf{w}^T C^{N-2} \mathbf{v}}{Z_{N-1}} \\
&= \cdots = \frac{\mathbf{w}^T C^{(x-1)+N-1-x} D C^{(N-1-x)-(N-1-x)} \mathbf{v}}{Z_{N-1}} \\
&+ (N-1-x) \frac{Z_{N-2}}{Z_{N-1}}
\end{aligned}
$$

Densidade de partículas

$$
\begin{aligned}
&= \frac{\mathbf{w}^T C^{N-2} D \mathbf{v}}{Z_{N-1}} + (N-1-x)\frac{Z_{N-2}}{Z_{N-1}} \\
&= \frac{\mathbf{w}^T C^{N-2}(N^\theta + \beta C)\mathbf{v}}{Z_{N-1}} + \ (N-1-x)\frac{Z_{N-2}}{Z_{N-1}}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\langle \eta(x) \rangle_{\mu_{ss}}^{N-1} &= \beta + \frac{(\alpha-\beta)(N-x+N^\theta-1)}{2N^\theta+N-2} \\
&= \beta + (N-x)\frac{\alpha-\beta}{2N^\theta+N-2} + (N^\theta-1)\frac{\alpha-\beta}{2N^\theta+N-2}.
\end{aligned}
$$

Função de correlação de segunda ordem

$$\begin{aligned}\langle \eta(x); \eta(y) \rangle_{\mu_{ss}}^{N-1} &= \langle \eta(x)\eta(y) \rangle_{\mu_{ss}}^{N-1} - \langle \eta(x) \rangle_{\mu_{ss}}^{N-1} \langle \eta(y) \rangle_{\mu_{ss}}^{N-1} \\ &= -\frac{(\alpha-\beta)^2 (x + N^{\theta} - 1)(N - y + N^{\theta} - 1)}{(2N^{\theta} + N - 2)^2 (2N^{\theta} + N - 3)}.\end{aligned}$$

- Dada uma configuração $\eta \in \{0,1\}^{\Sigma_N}$, a corrente microscópica média entre os sítios x e $x+1$ no bulk do PMM em contato com reservatórios com respeito a uma medida μ qualquer, é dada por

$$\begin{aligned}\langle j_{x,x+1}(\eta)\rangle_\mu &= \langle(\eta(x)-\eta(x+1))(\eta(x-1)+\eta(x+2))\rangle_\mu \\ &= \langle\eta(x-1)\big(\eta(x)(1-\eta(x+1))-\eta(x+1)(1-\eta(x))\big) \\ &+ (\eta(x)(1-\eta(x+1))-\eta(x+1)(1-\eta(x)))\eta(x+2)\rangle_\mu.\end{aligned}$$

- Dada uma medida estacionária μ_{ss}, podemos escrever a corrente microscópica média no bulk na forma matricial como

$$\begin{aligned}
\langle j_{x,x+1}(\eta)\rangle_{\mu_{ss}} &= \frac{\mathbf{w}^T C^{x-2} D[DE - ED] C^{(N-1)-(x+1)}\mathbf{v}}{Z_{N-1}} \\
&+ \frac{\mathbf{w}^T C^{x-1}[DE - ED] D C^{(N-1)-(x+2)}\mathbf{v}}{Z_{N-1}} \\
&= \frac{\mathbf{w}^T C^{x-2}[DDEC - DEDC + CDED - CEDD] C^{(N-1)-(x+2)}\mathbf{v}}{Z_{N-1}} \\
&= \frac{\mathbf{w}^T C^{x-2}[(DDE - DED)C + C(DED - EDD)] C^{(N-1)-(x+2)}\mathbf{v}}{Z_{N-1}}.
\end{aligned}$$

- Dada uma medida estacionária μ_{ss}, podemos escrever a corrente microscópica média no bulk na forma matricial como

$$
\begin{aligned}
\langle j_{x,x+1}(\eta)\rangle_{\mu_{ss}} = & \frac{\mathbf{w}^T C^{x-2} D[DE - ED] C^{(N-1)-(x+1)}\mathbf{v}}{Z_{N-1}} \\
+ & \frac{\mathbf{w}^T C^{x-1}[DE - ED] D C^{(N-1)-(x+2)}\mathbf{v}}{Z_{N-1}} \\
= & \frac{\mathbf{w}^T C^{x-2}[DDEC - DEDC + CDED - CEDD] C^{(N-1)-(x+2)}\mathbf{v}}{Z_{N-1}} \\
= & \frac{\mathbf{w}^T C^{x-2}[(DDE - DED)C + C(DED - EDD)] C^{(N-1)-(x+2)}\mathbf{v}}{Z_{N-1}}.
\end{aligned}
$$

- Nas fronteiras temos

$$
\begin{aligned}
\langle j_{0,1}(\eta)\rangle_{\mu_{ss}} &= \frac{\mathbf{w}^T(\alpha E - (1-\alpha)D)C^{N-2}\mathbf{v}}{Z_{N-1}} \\
\langle j_{N-1,N}(\eta)\rangle_{\mu_{ss}} &= \frac{\mathbf{w}^T C^{N-2}((1-\beta)D - \beta E)\mathbf{v}}{Z_{N-1}}.
\end{aligned}
$$

- A esperança com respeito ao estado estacionário da corrente microscópica no bulk e nas fronteiras coincidem. Assim

$$\langle j_{x,x+1}(\eta)\rangle_{\mu_{ss}} = \frac{\mathbf{w}^T(\alpha E - (1-\alpha)D)C^{N-2}\mathbf{v}}{Z_{N-1}}$$

$$= \frac{\mathbf{w}^T C^{N-2}((1-\beta)D - \beta E)\mathbf{v}}{Z_{N-1}}$$

$$= \frac{\mathbf{w}^T C^{x-2}[(DDE - DED)C + C(DED - EDD)]C^{(N-1)-(x+2)}\mathbf{v}}{Z_{N-1}}.$$

- A esperança com respeito ao estado estacionário da corrente microscópica no bulk e nas fronteiras coincidem. Assim

$$
\begin{aligned}
\langle j_{x,x+1}(\eta)\rangle_{\mu_{ss}} = \; & \frac{\mathbf{w}^T(\alpha E-(1-\alpha)D)C^{N-2}\mathbf{v}}{Z_{N-1}} \\
= \frac{\mathbf{w}^T C^{N-2}((1-\beta)D-\beta E)\mathbf{v}}{Z_{N-1}} & \\
= \frac{\mathbf{w}^T C^{x-2}[(DDE-DED)C+C(DED-EDD)]C^{(N-1)-(x+2)}\mathbf{v}}{Z_{N-1}}. &
\end{aligned}
$$

- Para termos a igualdade acima as matrizes precisam satisfazer as seguintes condições

$$
\begin{aligned}
DDE-DED=DD+ED=CD, \\
DED-EDD=EE+ED=EC, \\
\mathbf{w}^T(\alpha E-(1-\alpha)D)=\mathbf{w}^T, \\
((1-\beta)D-\beta E)\mathbf{v}=\mathbf{v}.
\end{aligned}
$$

- Portanto, a expressão anterior é a álgebra de matrizes para o PMM em contato com reservatórios.

- Portanto, a expressão anterior é a álgebra de matrizes para o PMM em contato com reservatórios.
- As duas últimas propriedades são obtidas do mesmo modo que no SSEP em contato com reservatórios.

- Portanto, a expressão anterior é a álgebra de matrizes para o PMM em contato com reservatórios.
- As duas últimas propriedades são obtidas do mesmo modo que no SSEP em contato com reservatórios.
- Já as duas primeiras propriedades são obtidas analisando o produto matricial CCC e perguntando-se quais as propriedades que as expressões $DDE - DED$ e $DED - EDD$ devem satisfazer de modo que o numerador da expressão para a corrente microscópica média seja constante, isto é, dado por $\mathbf{w}^T C^{N-2}\mathbf{v}$.

Referências

- DERRIDA, B.; LEBOWITZ, J. L.; SPEER, E. R. *Large deviation of the density profile in the steady state of the open symmetric simple exclusion process*. Journal of Statistical Physics 107 (2002), 599-634.
- DERRIDA, B.; LEBOWITZ, J. L.; SPEER, E. R. *Entropy of open lattice systems*. Journal of Statistical Physics (2007).
- FRANCO, T.; GONÇALVES, P.; NEUMANN, A. *Hydrodynamical behavior of symmetric exclusion with slow bonds*. Ann. Inst. H. Poincaré: Probab. Statist. 49, 2 (2013), 402-427.
- FRANCO, T.; GONÇALVES, P.; NEUMANN, A. *Non-equilibrium and stationary fluctuations of a slowed boundary symmetric exclusion*. Online, ArXiv, https://arxiv.org/abs/1608.04317 (2016).
- KIPNIS, C.; LANDIM, C. *Scaling limits of interacting particle systems*. Springer (1999).

Referências

- LANDIM, C.; MILANES, A.; OLLA, S. *Stationary and non-equilibrium fluctuations in boundary driven exclusion processes*. Markov Processes and Related Fields 14, 2 (2008), 165-184.
- LIGGETT, M. T. *Continuous Time Markov Processes*. American Mathematical Society (2010).
- LIGGETT, M. T. *Interacting Particle Systems*. Springer (2005).
- LIGGETT, M. T. *Stochastic Interacting Systems: Contact, Voter and Exclusion Processes*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1999).
- VELÁZQUEZ, J. J. L. *The porous medium equation: mathematical theory*. Clarendon (2007).

Obrigado!