Construção do Limite de Saturação
Termodinâmico
para o “Parking Process”
e Outros Esquemas de Exclusão
em $\mathbb{Z}^d$

Thomas Logan Ritchie

★

Orientador:
Prof. Dr. Pablo Augusto Ferrari

Tese apresentada ao
Instituto de Matemática e Estatística
da Universidade de São Paulo
para a obtenção do grau de Doutor em Estatística.
Área de concentração: **Probabilidade.**

-São Paulo, dezembro de 200

Construção do Limite de Saturação
Termodinâmico
para o “Parking Process”
e Outros Esquemas de Exclusão
em $\mathbb{Z}^d$

Este exemplar corresponde à versão final
da tese de doutorado de Thomas Logan Ritchie,
corrigida e aprovada pela comissão julgadora.

São Paulo, 20 de março de 2005.

Comissão Julgadora:

- Luiz Renato Fontes -IME-USP
- Serguei Popov -IME-USP
- Domingos Urbano Marchetti -IF-USP
- Mário José de Oliveira -IF-USP
- Nancy Garcia Lopes -IMECC-UNICAMP

Agradecimentos

O autor agradece a Geraldine Góes Bosco e a Pablo Augusto Ferrari pelas observações e sugestões recebidas durante o desenvolvimento desta tese e à FAPESP (Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo) pelo apoio financeiro (processo 00/09052-3).

Resumo

Apresentamos uma construção explícita do limite de saturação termodinâmico para o “parking process” e outros esquemas de deposição com exclusão de alcance finito em $\mathbb{Z}^d$. Por meio desta construção, consegue-se uma lei forte dos grandes números para as densidades de ocupação, e, entre outros resultados, estabelece-se o decaimento super-exponencial das funções de correlação .

Abstract

We provide an explicit construction of the thermodynamic jamming limit for the parking process and other finite range exclusion schemes on $\mathbb{Z}^d$. By means thereof a strong law of large numbers for occupation densities is accomplished, and, amongst other results, the so called “super-exponential” (i.e. gamma) decay of pair-correlation functions is established.

O artigo que deu origem à esta tese encontra-se publicado no *Journal of Statistical Physics* (Vol.122, No.3, 381-398).

SUMÁRIO

1. Introdução	1
2. Notação e Definições Básicas	2
Espaços Topológicos e Espaços de Probabilidade	2
Grafos	3
Esquemas de Estacionamento	3
Processos de Estacionamento	3
3. Construção do Limite Termodinâmico	4
4. Uma Lei Forte para as Densidades de Ocupação	9
5. Comportamento Super-exponential	11
5.1. Decaimento Super-exponential das Funções de Correlação	12
5.2. Velocidade de Convergência ao Limite Termodinâmico	15
6. Estimativas Numéricas Rigorosas e Observações Finais	16
Apêndice A. Perspectivas de Pesquisa e Resultados Recentes	19
Referências	22

CONSTRUÇÃO DO LIMITE DE SATURAÇÃO TERMODINÂMICO PARA O “PARKING PROCESS” E OUTROS ESQUEMAS DE EXCLUSÃO EM $\mathbb{Z}^d$

THOMAS LOGAN RITCHIE

RESUMO. Apresentamos uma construção explícita do limite de saturação termodinâmico para o “parking process” e outros esquemas de deposição com exclusão de alcance finito em $\mathbb{Z}^d$. Por meio desta construção, consegue-se uma lei forte dos grandes números para as densidades de ocupação, e, entre outros resultados, estabelece-se o decaimento super-exponencial das funções de correlação.

1. INTRODUÇÃO

Em sua versão mais simples o “car-parking process” em $\mathbb{Z}^d$ - também conhecido como *adsorção seqüencial aleatória* (ASA) nas ciências físicas - pode ser informalmente descrito como segue:

*um sítio é escolhido uniformemente sobre a caixa $\Lambda_n^{(d)} = \{-n, \dots, 0, \dots, n\}^d$ - a região alvo - e é ocupado (spin 1) desde que seus vizinhos mais próximos estejam vacantes (spin 0). Uma vez ocupado, um sítio permanece neste estado para sempre. O processo continua até que todos os sítios na caixa $\Lambda_n^{(d)}$ estejam ocupados ou bloqueados, i.e. tenham pelo menos um de seus vizinhos mais próximos ocupados. Este instante denomina-se “jamming limit” - ou limite de saturação, em português. Designamos por P_n a configuração terminal em $\Lambda_n^{(d)}$ no limite de saturação.*¹

Este modelo, assim como várias de suas generalizações - como aquelas que admitem interações de longo alcance e mais de um tipo de partículas, há muito vêm sendo estudados na física e em outras ciências experimentais; onde tópicos como a dinâmica perto da saturação, correlações espaciais, o comportamento assintótico dos primeiros momentos de $|P_n|$ (o número final de partículas adsorvidas), entre outros, foram analisados por métodos teóricos não rigorosos, simulações computacionais e procedimentos experimentais [6, 18].

Até recentemente, resultados matemáticos rigorosos tinham se restringido a modelos unidimensionais [9, 13, 12, 16, 14, 3] ou quase unidimensionais [7, 1, 2].

Date: 04 de julho de 2004.

1991 Mathematics Subject Classification. 60K99.

Key words and phrases. random sequential adsorption (RSA), parking process, pair correlation functions, super-exponential decay, thermodynamic limit, perfect simulation, multidimensional ergodic theorem.

Patrocinado pela FAPESP: processo 00/09052-3.

¹Ao longo deste trabalho usaremos o símbolo P_n para denotar não apenas a configuração terminal, mas também o algoritmo que a produz. Uma vez que consideraremos apenas configurações terminais, esta identificação é aceitável.

Em 2002 Mathew Penrose provou, entre outros resultados, uma lei (fraca) dos grandes números para a seqüência $\left(|P_n|/|\Lambda_n^{(d)}|\right)_{n \geq 0}$ para uma série de modelos de deposição/exclusão - incluindo aqueles que admitem a existência de vários tipos de partículas, tratados como sistemas de partículas interagentes finitos. [15]

Neste trabalho são construídos num mesmo espaço de probabilidade (i.e. acoplados) um algoritmo P sobre todo o reticulado $\mathbb{Z}^d$, ao lado de uma seqüência correspondente de algoritmos de deposição/exclusão P_n , $n \geq 0$ - sobre as caixas $\Lambda_n^{(d)}$ - de tal modo que P_n convirja para P quase certamente. Esta construção sendo suficientemente geral para lidar com toda sorte de interações de exclusão de alcance finito num cenário com apenas uma espécie de partícula - spins 0/1. Neste contexto a configuração terminal P pode ser interpretada como o limite de saturação de um processo de deposição/exclusão virtual que teria toda a rede $\mathbb{Z}^d$ como área-alvo. Denominaremos P , assim como a sua correspondente distribuição μ , o limite termodinâmico da seqüência $(P_n)_{n \geq 0}$.

Por meio desta construção (seção 3), provamos uma lei forte dos grandes números para a seqüência $\left(|P_n|/|\Lambda_n^{(d)}|\right)_{n \geq 0}$ via o teorema ergódico multiparamétrico (seção 4); o decaimento super-exponencial das funções de correlação (subseção 5.1); a taxa de convergência super-exponencial para o limite termodinâmico μ (subseção 5.2) e discutimos como obter estimativas superiores e inferiores rigorosas para ρ , o limite quase certo da seqüência $\left(|P_n|/|\Lambda_n^{(d)}|\right)_{n \geq 0}$ (seção 6).

2. NOTAÇÃO E DEFINIÇÕES BÁSICAS

As estruturas seguintes serão blocos básicos em nossa construção. Assim, aproveitamos a oportunidade para estabelecer a notação a ser utilizada nesta tese.

Espaços Topológicos e Espaços de Probabilidade. Os objetos aleatórios com os quais lidaremos nesta tese serão definidos em um espaço de probabilidade fundamental (i) e assumirão valores num espaço de medida polonês² (ii). Como esta tese é essencialmente construtiva, definimos explicitamente estes espaços:

- (i): $\left((0, 1)^{\mathbb{Z}^d}, \mathcal{B}_{(0,1)}^{\mathbb{Z}^d}, \lambda_{(0,1)}^{\mathbb{Z}^d}\right)$, onde $\mathcal{B}_{(0,1)}$ é a sigma-álgebra de Borel em $(0, 1)$, $\lambda_{(0,1)}$ é a medida de Lebesgue em $(0, 1)$ e $\cdot^{\mathbb{Z}^d}$ significa produto no sentido apropriado;
- (ii): $\left(\{0, 1\}^{\mathbb{Z}^d}, \mathcal{B}_{\{0,1\}}^{\mathbb{Z}^d}\right)$, onde $\mathcal{B}_{\{0,1\}}$ é o conjunto das partes de $\{0, 1\}$, $\mathcal{P}(\{0, 1\}) \stackrel{\text{def}}{=} \{\{0, 1\}, \{0\}, \{1\}, \emptyset\}$.

Como $(0, 1)$ e $\{0, 1\}$ são espaços topológicos poloneses (com as métricas euclidiana e discreta respectivamente), $(0, 1)^{\mathbb{Z}^d}$ e $\{0, 1\}^{\mathbb{Z}^d}$ também serão espaços topológicos poloneses (com as respectivas topologias produto). Além disto, as sigma-álgebras produto $\mathcal{B}_{(0,1)}^{\mathbb{Z}^d}$ e $\mathcal{B}_{\{0,1\}}^{\mathbb{Z}^d}$ correspondem às sigma-álgebras de Borel destes espaços poloneses. Portanto $\left((0, 1)^{\mathbb{Z}^d}, \mathcal{B}_{(0,1)}^{\mathbb{Z}^d}\right)$ e $\left(\{0, 1\}^{\mathbb{Z}^d}, \mathcal{B}_{\{0,1\}}^{\mathbb{Z}^d}\right)$ são espaços de medida poloneses.

²espaço de medida cuja sigma-álgebra é gerada por uma topologia metrizável, completa e separável.

Estas observações podem parecer pedantes à primeira vista, mas elas são necessárias para se concluir a convergência em distribuição a partir da convergência quase-certa de objetos aleatórios, o que faremos a seguir.

Grafos. No que segue, a noção de vizinhança entre sítios da rede $\mathbb{Z}^d$ será implementada pelo grafo $\mathcal{G}_\nu^{(d)} \stackrel{\text{def}}{=} (\mathbb{Z}^d, \mathcal{E}_\nu^{(d)})$, onde $\mathcal{E}_\nu^{(d)}$ é o conjunto de elos ligando os sítios x, y em $\mathbb{Z}^d$ com $|x - y|_{\text{sup}} \stackrel{\text{def}}{=} \max_{1 \leq i \leq d} |x_i - y_i| \leq \nu$, para alguma distância ν em $\mathbb{N}^* \stackrel{\text{def}}{=} \mathbb{N} \setminus \{0\}$.

Esquemas de Estacionamento. Um subconjunto $S_\nu^{(d)} \subset \{0, 1\}^{\Lambda_\nu^{(d)}}$, onde $\Lambda_\nu^{(d)} \stackrel{\text{def}}{=} \{-\nu, \dots, 0, \dots, \nu\}^d$ é a caixa/bola centrada na origem e raio ν na rede $\mathbb{Z}^d$, tal que $S_\nu^{(d)} \ni 0^{\Lambda_\nu^{(d)}}$ será chamado um *esquema de estacionamento* na rede $\mathbb{Z}^d$ (com raio ν de interação).³

Processos de Estacionamento. Para um dado esquema de estacionamento $S_\nu^{(d)}$, definimos o *processo de estacionamento* na caixa $\Lambda_n^{(d)}$ com condição de fronteira nula, $(\Lambda_n^{(d)} S_\nu^{(d)}) \text{PEcfn}$, como sendo o seguinte algoritmo (aleatório):

Passo 1: faça $P_n = 0^{\mathbb{Z}^d}$;

Passo 2: escolha um sítio $x \in \Lambda_n^{(d)}$ uniformemente entre os sítios ainda não escolhidos;

Passo 3: Se $\theta_x(P_n) | \Lambda_\nu^{(d)} \in S_\nu^{(d)}$, então $P_n(x) \leftarrow 1$;

Passo 4: Se ainda houver sítios não escolhidos em $\Lambda_n^{(d)}$, então volte ao passo 2, caso contrário encerre o algoritmo.

Acima, para $y \in \mathbb{Z}^d$, θ_y é o operador de translação, i.e. para toda configuração $P \in \{0, 1\}^{\mathbb{Z}^d}$, $\theta_y(P)(x) \stackrel{\text{def}}{=} P(x + y)$ e $P | \Lambda_\nu^{(d)}$ significa a restrição de P à caixa $\Lambda_\nu^{(d)}$, ou seja, $P | \Lambda_\nu^{(d)} \in \{0, 1\}^{\Lambda_\nu^{(d)}}$ e, para todo $x \in \Lambda_\nu^{(d)}$, $P | \Lambda_\nu^{(d)}(x) \stackrel{\text{def}}{=} P(x)$.

Está claro que o algoritmo descrito acima gera um objeto aleatório P_n no espaço de medida $(\{0, 1\}^{\mathbb{Z}^d}, \mathcal{B}_{\{0, 1\}}^{\mathbb{Z}^d})$ e, portanto, uma medida de probabilidade é aí induzida.

Colocamos estas idéias num contexto probabilístico por meio da seguinte definição:

Definição 2.1. Para um dado esquema de estacionamento $S_\nu^{(d)}$, definimos o *processo de estacionamento* na caixa $\Lambda_n^{(d)}$ com condição de fronteira nula, $(\Lambda_n^{(d)} S_\nu^{(d)}) \text{PEcfn}$, como sendo o seguinte algoritmo:

Para cada $\omega \in (0, 1)^{\mathbb{Z}^d}$,

Passo 1: faça $P_n(\omega) = 0^{\mathbb{Z}^d}$;

Passo 2: escolha $x \in \Lambda_n^{(d)}$ tal que

$\omega(x) = \inf\{\omega(\xi) : \xi \in \Lambda_n^{(d)} \text{ e } \xi \text{ ainda não tenha sido escolhido}\}$;

Passo 3: se $\theta_x(P_n(\omega)) | \Lambda_\nu^{(d)} \in S_\nu^{(d)}$, então $P_n(\omega)(x) \leftarrow 1$;

Passo 4: se ainda houver sítios não escolhidos em $\Lambda_n^{(d)}$, então volte ao passo 2, caso contrário encerre o algoritmo.

³Como ficará claro nas definições seguintes, podemos supor sem perda de generalidade que $\eta(0^d) = 0$ para todo $\eta \in S_\nu^{(d)}$.

□

O algoritmo descrito acima é probabilisticamente equivalente ao primeiro algoritmo (informal) no sentido de que ambos induzem a mesma medida de probabilidade μ_n no espaço de medida $(\{0, 1\}^{\mathbb{Z}^d}, \mathcal{B}_{\{0,1\}}^{\mathbb{Z}^d})$. Isto ocorre devido ao fato de que o mínimo de uma família *iid* finita de variáveis aleatórias uniformes está uniformemente distribuído entre elas.

Chamaremos a configuração gerada $P_n(\omega)$ o *limite de saturação* do processo de estacionamento⁴ e observamos que P_n é um objeto aleatório definido no espaço de probabilidade fundamental $((0, 1)^{\mathbb{Z}^d}, \mathcal{B}_{(0,1)}^{\mathbb{Z}^d}, \lambda_{(0,1)}^{\mathbb{Z}^d})$ e assumindo valores em $\{0, 1\}^{\mathbb{Z}^d}$.

Finalmente ressaltamos que cada $P_n, n \geq 0$ está bem (i.e. unicamente) definido, exceto por um conjunto de probabilidade zero; ambigüidades podendo ocorrer em ω 's tais que $\omega(x) = \omega(y)$ para pelo menos dois sítios distintos $x, y \in \mathbb{Z}^d$. Retornaremos a este ponto posteriormente, mas, como é comum em probabilidade, estas patologias não nos causarão maiores problemas.

Uma questão que surge naturalmente neste ponto é a existência (ou não) de uma medida de probabilidade limite μ (o limite termodinâmico) para a seqüência $(\mu_n)_{n \geq 1}$ de leis em $(\{0, 1\}^{\mathbb{Z}^d}, \mathcal{B}_{\{0,1\}}^{\mathbb{Z}^d})$ induzidas pela seqüência $(P_n)_{n \geq 1}$ de objetos aleatórios que acabamos de definir. A próxima seção reporta-se à esta questão.

3. CONSTRUÇÃO DO LIMITE TERMODINÂMICO

No que segue, provaremos que, para um dado esquema de estacionamento $S_\nu^{(d)}$, existe uma única medida de probabilidade μ em $(\{0, 1\}^{\mathbb{Z}^d}, \mathcal{B}_{\{0,1\}}^{\mathbb{Z}^d})$ tal que $\mu_n \Rightarrow \mu$. A prova deste fato será realizada a partir da construção de um objeto aleatório $P : ((0, 1)^{\mathbb{Z}^d}, \mathcal{B}_{(0,1)}^{\mathbb{Z}^d}, \lambda_{(0,1)}^{\mathbb{Z}^d}) \longrightarrow (\{0, 1\}^{\mathbb{Z}^d}, \mathcal{B}_{\{0,1\}}^{\mathbb{Z}^d})$ tal que $P_n \rightarrow P$ q.c.⁵

Para este fim, estabelecemos as seguintes definições :

Definição 3.1. Um caminho no grafo $\mathcal{G}_\nu^{(d)}$ é uma seqüência finita $(x_i)_{0 \leq i \leq n}$, $x_i \in \mathbb{Z}^d$; tal que $|x_{i+1} - x_i|_{\text{sup}} \leq \nu$, $0 \leq i \leq n - 1$. □

Por convenção, diremos que o comprimento do caminho $(x_i)_{0 \leq i \leq n}$ é n (e não $n + 1$), considerando que n elos participam deste caminho.

Definição 3.2. Dizemos que o caminho $(x_i)_{0 \leq i \leq n}$ é decrescente (em relação a $\omega \in (0, 1)^{\mathbb{Z}^d}$), quando a seqüência numérica $(x_i(\omega))_{0 \leq i \leq n}$ for estritamente decrescente.⁶ Neste caso, escrevemos $\downarrow_{(\omega)} (x_i)_{0 \leq i \leq n}$, ou simplesmente $\downarrow (x_i)_{0 \leq i \leq n}$, caso ω fique subentendido no contexto. □

Segue diretamente da definição 3.2 que um caminho decrescente não possui auto-intersecções.

Definição 3.3. Para $x, y \in \mathbb{Z}^d$ e $\omega \in (0, 1)^{\mathbb{Z}^d}$, dizemos que x é influenciado por y (ou, equivalentemente, que y influencia x) na configuração ω , se houver

⁴No texto que segue frequentemente abusaremos da terminologia e empregaremos P_n para designar também o processo de estacionamento que a gerou.

⁵Naturalmente a convergência quase-certa aqui é relativa à topologia produto $\{0, 1\}^{\mathbb{Z}^d}$.

⁶ $x_i(\omega)$ significa $\omega(x_i)$.

um caminho decrescente $\downarrow_{(\omega)} (x_i)_{0 \leq i \leq n}$, tal que $x_0 = x$ e $x_n = y$. Neste caso, escrevemos $y \uparrow_{(\omega)} x$, ou simplesmente $y \uparrow x$, caso ω esteja subentendido no contexto. $\square$

Observamos que a relação $\uparrow$ é transitiva e reflexiva.

Definição 3.4. Dado um subconjunto $X \subset \mathbb{Z}^d$, definimos a armadura de X (na configuração $\omega \in (0, 1)^{\mathbb{Z}^d}$) como sendo o conjunto (aleatório)

$$\mathcal{A}(X)(\omega) \stackrel{\text{def}}{=} \{y \in \mathbb{Z}^d : \exists x \in X : y \uparrow_{(\omega)} x\}$$

$\square$

Como anteriormente, omitiremos ω sempre que não houver ambigüidade. Segue diretamente da definição 3.4 que, para quaisquer subconjuntos $X, Y \subset \mathbb{Z}^d$ e qualquer configuração $\omega \in (0, 1)^{\mathbb{Z}^d}$,

- (i): $\mathcal{A}(X)(\omega) \supset X$;
- (ii): $X = \uplus_{i=1}^n X_i \Rightarrow \mathcal{A}(X)(\omega) = \bigcup_{i=1}^n \mathcal{A}(X_i)(\omega)$; ⁷
- (iii): $X \subset Y \Rightarrow \mathcal{A}(X)(\omega) \subset \mathcal{A}(Y)(\omega)$.

O próximo lema, entretanto, nos pede uma demonstração.

Lemma 3.1. Para todo subconjunto finito $X \subset \mathbb{Z}^d$, $\mathcal{A}(X)$ é (quase-certamente) finito.

Prova:

Dividimos a prova em três partes:

Parte (i)

Suponha inicialmente que $X = \{0\}$ e considere o evento $A_n \stackrel{\text{def}}{=} (\mathcal{A}(X) \not\subset \Lambda_{n\nu}^{(d)})$, $n \in \mathbb{N}$. Portanto A_n é o evento de que exista algum $y \in \mathbb{Z}^d \setminus \Lambda_{n\nu}^{(d)}$ tal que $y \uparrow 0$, ou seja, exista um caminho decrescente (e portanto sem auto-intersecções) $(x_i)_{0 \leq i \leq m}$, $m > n$, começando em 0 e terminando fora da caixa $\Lambda_{n\nu}^{(d)}$. Logo A_n ocorre somente se houver um caminho decrescente de comprimento n , $(x_i)_{0 \leq i \leq n}$ começando em 0. Observe agora que a probabilidade de que um caminho sem auto-intersecções arbitrário (mas fixo) $(x_i)_{0 \leq i \leq n}$ seja decrescente é $1/(n+1)!$ e que o número total de caminhos começando em 0 com comprimento n não é maior que $(2\nu+1)^{d \cdot n}$, para concluir, por subaditividade, que

$$(1) \quad \mathbb{P}(A_n) \leq \frac{(2\nu+1)^{d \cdot n}}{(n+1)!} \leq \frac{(2\nu+1)^{d \cdot n}}{n!}$$

Como a seqüência de eventos $(A_n)_{n \geq 0}$ é decrescente e $\mathbb{P}(A_n) \rightarrow 0$ por (1), segue que $\mathbb{P}(\bigcap_{n=0}^{\infty} A_n) = 0$. Agora observe que $\{\#\mathcal{A}(X) = \infty\} = \bigcap_{n=0}^{\infty} A_n$ para concluir que $\mathbb{P}(\{\#\mathcal{A}(X) < \infty\}) = \{\#\mathcal{A}(X) = \infty\}^c = 1$, ou seja $\mathcal{A}(\{0\})$ é quase-certamente finita.

Parte (ii)

Faça $X = \{x\}$, para algum $x \in \mathbb{Z}^d$.

Neste caso observamos que $\{\#\mathcal{A}(X) < \infty\} = \theta_{-x}(\{\#\mathcal{A}(\{0\}) < \infty\})$ e invocamos

⁷ $\uplus$ significa união disjunta.

a estacionaridade da medida produto $\lambda_{(0,1)}^{\mathbb{Z}^d}$ para concluir que $\mathbb{P}(\{\#\mathcal{A}(X) < \infty\}) = \mathbb{P}(\{\#\mathcal{A}(\{0\}) < \infty\}) = 1$, pela parte (i) acima, ou seja $\mathcal{A}(\{x\})$ é quase certamente finita para todo $x \in \mathbb{Z}^d$.

Observação : poderíamos ter observado a igualdade

$$\left\{ \mathcal{A}(\{x\}) \not\subset B(x, n\nu) \stackrel{\text{def}}{=} \{y \in \mathbb{Z}^d : |y - x|_{\text{sup}} \leq n\nu\} \right\} = \theta_{-x} \left\{ \left(\mathcal{A}(\{0\}) \not\subset \Lambda_{n\nu}^{(d)} \right) \right\}$$

usado a estacionaridade de $\lambda_{(0,1)}^{\mathbb{Z}^d}$ para ver que

$$\mathbb{P}(\mathcal{A}(\{x\}) \not\subset B(x, n\nu)) = \mathbb{P}(\theta_{-x}(\mathcal{A}(\{0\}) \not\subset \Lambda_{n\nu}^{(d)}) = \mathbb{P}(\mathcal{A}(\{0\}) \not\subset \Lambda_{n\nu}^{(d)})$$

e seguido os mesmos passos da parte (i) para provar que $\mathcal{A}(\{x\})$ é quase-certamente finita.

Este tipo de argumento será recorrente nas provas a seguir.

Parte (iii)

Seja X um subconjunto finito de $\mathbb{Z}^d$, ou seja $X = \bigcup_{i=1}^n \{x_i : x_i \in X\}$ para algum $n \in \mathbb{N}$. Assim, pela observação feita após a definição 3.4, temos que $\mathcal{A}(X) = \bigcup_{i=1}^n \mathcal{A}(\{x_i\}) \Rightarrow \{\#\mathcal{A}(X) = \infty\} = \bigcup_{i=1}^n \{\#\mathcal{A}(\{x_i\}) = \infty\} \Rightarrow \mathbb{P}(\{\#\mathcal{A}(X) = \infty\}) \leq \sum_{i=1}^n \mathbb{P}(\{\#\mathcal{A}(\{x_i\}) = \infty\}) = 0$ pela parte (ii) acima. Ou seja, $\mathcal{A}(X)$ é quase certamente finita. ■

No que segue será conveniente estender os *processos de estacionamento* em caixas (definição 2.1) para *processos de estacionamento* em subconjuntos finitos arbitrários de $\mathbb{Z}^d$. Esta generalização é imediata:

Definição 3.5. *Seja X um subconjunto finito de $\mathbb{Z}^d$. Para um esquema de estacionamento $S_\nu^{(d)}$ dado, definimos o processo de estacionamento na região-alvo X com condição de fronteira nula, $(X, S_\nu^{(d)})$ PPnbc, como sendo o seguinte algoritmo:*

Para cada $\omega \in (0, 1)^{\mathbb{Z}^d}$,

Passo 1: *faça $P_X(\omega) = 0^{\mathbb{Z}^d}$;*

Passo 2: *escolha $x \in X$ tal que*

$\omega(x) = \inf\{\omega(\xi) : \xi \in X \text{ e } \xi \text{ não tenha ainda sido escolhido}\};$

Passo 3: *se $\theta_x(P_X(\omega))| \Lambda_\nu^{(d)} \in S_\nu^{(d)}$, então $P_X(\omega)(x) \leftarrow 1$;*

Step 4: *se ainda houver sítios não escolhidos em X , então retorne ao passo 2, caso contrário encerre o algoritmo.*

□

Como antes, chamamos a saída $P_X(\omega)$ o *limite de saturação* do processo de estacionamento sobre X e observamos que P_X é um objeto aleatório definido no espaço de probabilidade fundamental $((0, 1)^{\mathbb{Z}^d}, \mathcal{B}_{(0,1)}^{\mathbb{Z}^d}, \lambda_{(0,1)}^{\mathbb{Z}^d})$ e assumindo valores em $\{0, 1\}^{\mathbb{Z}^d}$.

Agora estamos em condições de apresentar a definição do objeto aleatório limite P , mencionado no início desta seção.

Definição 3.6. *O algoritmo/objeto aleatório limite*

$P : \left((0, 1)^{\mathbb{Z}^d}, B_{(0,1)}^{\mathbb{Z}^d}, \lambda_{(0,1)}^{\mathbb{Z}^d} \right) \rightarrow \left(\{0, 1\}^{\mathbb{Z}^d}, B_{\{0,1\}}^{\mathbb{Z}^d} \right)$ é definido por

$$P(\omega)(x) \stackrel{\text{def}}{=} P_{\mathcal{A}(\{x\})(\omega)}(\omega)(x), \forall x \in \mathbb{Z}^d$$

□

Em palavras, a definição 3.6 acima quer dizer que, para cada $\omega \in (0, 1)^{\mathbb{Z}^d}$ e $x \in \mathbb{Z}^d$, determinamos a *armadura* do conjunto $\{x\}$, $\mathcal{A}(\{x\})$, por meio da definição 3.4, implementamos o processo de estacionamento sobre a região-alvo $\mathcal{A}(\{x\})$ de acordo com a definição 3.5 e então assinalamos o valor do limite de saturação obtido $P_{\mathcal{A}(\{x\})}$ no sítio x a $P(\omega)(x)$. Naturalmente, um esquema de estacionamento $S_\nu^{(d)}$ está implícito na definição 3.6.

Nosso próximo passo será provar que $P_n \rightarrow P$ q.c. Para este fim, precisaremos do seguinte lema:

Lemma 3.2. $\forall x \in \mathbb{Z}^d, \forall n \in \mathbb{N}$,

$P_n|_{\mathcal{A}(\{x\})} = P_{\mathcal{A}(\{x\})}|_{\mathcal{A}(\{x\})}$ em $\{\Lambda_n \supset \mathcal{A}(\{x\})\}$.

Em palavras o lema 3.2 afirma que as armaduras $\mathcal{A}(\{x\})$ são estáveis em relação à sequência $(P_n)_{n \geq 1}$; no sentido de que, uma vez que n seja grande o bastante para termos $\mathcal{A}(\{x\}) \subset \Lambda_n$, os *limites de saturação* $P_m, m \geq n$ se tornam idênticos sobre $\mathcal{A}(\{x\})$.

Na prova do lema 3.2 empregaremos as noções de *fronteira interior* e *fronteira exterior* de um conjunto $X \subset \mathbb{Z}^d$. Portanto estabelecemos a seguinte definição :

Definição 3.7. Para cada $\nu \geq 1$, a *fronteira interior* de $X \subset \mathbb{Z}^d$ é definida como sendo o conjunto

$$\delta_\nu^{(in)}(X) \stackrel{\text{def}}{=} \{x \in \mathbb{Z}^d : x \in X \text{ e } \exists y \in \mathbb{Z}^d \setminus X \text{ such that } |x - y|_{\text{sup}} \leq \nu\}$$

Da mesma maneira, a *fronteira exterior* de $X \subset \mathbb{Z}^d$ é definida como sendo o conjunto

$$\delta_\nu^{(out)}(X) \stackrel{\text{def}}{=} \{x \in \mathbb{Z}^d : x \notin X \text{ e } \exists y \in X \text{ such that } |x - y|_{\text{sup}} \leq \nu\}$$

□

Para não sobrecarregarmos a notação, omitiremos os índices subscritos, toda vez que ν estiver subentendido no contexto.

Observação: uma consequência imediata das definições 3.4 e 3.7 acima é que $x(\omega) \leq y(\omega)$, quando $x \in \delta^{(in)}(\mathcal{A}(X))$, $y \in \delta^{(out)}(\mathcal{A}(X))$ e $|x - y|_{\text{sup}} \leq \nu$, para todo subconjunto $X \subset \mathbb{Z}^d$. Ou seja, uma *armadura* tem a propriedade notável de que na interface com o exterior os seus sítios são numericamente menores que os correspondentes vizinhos exteriores.

Prova do lema 3.2: Inicialmente observamos que, para $x \in \mathbb{Z}^d$, (*quase-todo*) $\omega \in (0, 1)^{\mathbb{Z}^d}$ induz uma relação natural de ordem “ $\preceq$ ” em $\mathcal{A}(\{x\})(\omega) \subset \mathbb{Z}^d$, definida por: para $y, z \in \mathcal{A}(\{x\})$, $y \preceq z$, quando $y(\omega) \leq z(\omega)$. Desta forma, para (*quase-todo*) ω , pode-se construir uma sequência $(y_i)_{1 \leq i \leq \#\mathcal{A}(\{x\})}$ em $\mathcal{A}(\{x\})$, de tal forma que $y_j \preceq y_k$, quando $j \leq k$; sendo esta sequência (*quase-certamente*) univocamente determinada.

Agora, para uma realização ω e um tempo $\tau \in \{1, 2, \dots, \#\mathcal{A}(\{x\})(\omega)\}$, observamos os processos P_n (definição 2.1) e $P_{\mathcal{A}(\{x\})(\omega)}$ (definição 3.5) no instante τ , i.e. imediatamente antes de uma *chegada* (passo 2 dos algoritmos correspondentes) no sítio y_τ .

Concluimos a prova por indução (sobre τ):

Base da Indução:

Para $\tau = 1$, $P_n|\mathcal{A}(\{x\}) = P_{\mathcal{A}(\{x\})}|\mathcal{A}(\{x\}) = 0^{\mathcal{A}(\{x\})}$, pelo passo 1 das respectivas definições.

Hipótese de Indução

Suponha que $P_n|\mathcal{A}(\{x\}) = P_{\mathcal{A}(\{x\})}|\mathcal{A}(\{x\})$ no tempo $\tau \in \{1, 2, \dots, \#\mathcal{A}(\{x\})\}$.

Passo da Indução:

Se $y_\tau \notin \delta_\nu^{(in)}(\mathcal{A}(\{x\}))$, pela *hipótese de indução*, P_n e $P_{\mathcal{A}(\{x\})}$ são idênticos no instante τ em $B(y_\tau, \nu)$, e, portanto, $\theta_{y_\tau}(P_n)|\Lambda_\nu^{(d)} = \theta_{y_\tau}(P_{\mathcal{A}(\{x\})})|\Lambda_\nu^{(d)}$. Assim, pelo passo 3 das definições correspondentes, vemos que $P_n|\mathcal{A}(\{x\}) = P_{\mathcal{A}(\{x\})}|\mathcal{A}(\{x\})$ no instante $\tau + 1$.

Se $y_\tau \in \delta_\nu^{(in)}(\mathcal{A}(\{x\}))$, novamente, pela *hipótese de indução*, P_n e $P_{\mathcal{A}(\{x\})}$ coincidem em $B(y_\tau, \nu) \cap \mathcal{A}(\{x\})$. Mas, como $B(y_\tau, \nu) \cap (\mathcal{A}(\{x\}))^c \subset \delta_\nu^{(out)}(\mathcal{A}(\{x\}))$, nenhuma chegada (relativa a P_n) pode ter ocorrido nesta região até o instante τ (pela observação feita após a definição 3.7), e, portanto, P_n e $P_{\mathcal{A}(\{x\})}$ devem ser iguais a 0 aí. Desta forma, P_n e $P_{\mathcal{A}(\{x\})}$ coincidem novamente em toda bola $B(y_\tau, \nu)$ no instante τ , e, assim como antes, devemos ter $P_n|\mathcal{A}(\{x\}) = P_{\mathcal{A}(\{x\})}|\mathcal{A}(\{x\})$ no instante $\tau + 1$. ■

O lema 3.2 é a chave para o principal resultado desta seção, qual seja o

Teorema 3.3 (Convergência quase-certa para o algoritmo limite P).

$$P_n \rightarrow P \quad \lambda_{(0,1)}^{\mathbb{Z}^d} \text{ q.c.}$$

Observação: enfatizamos que a convergência quase-certa no teorema 3.3 é relativa à topologia produto em $\{0, 1\}^{\mathbb{Z}^d}$.

Prova:

Considerando a última observação, basta mostrar que, para quase-todo $\omega \in (0, 1)^{\mathbb{Z}^d}$ e todo $m \geq 0$, $P_n(\omega)|\Lambda_m^{(d)} = P(\omega)|\Lambda_m^{(d)}$, para n suficientemente grande.

Agora, dado $m \geq 0$, escolha n suficientemente grande para termos $\mathcal{A}(\Lambda_m^{(d)}) \subset \Lambda_n^{(d)}$. Isto é possível para quase-todo ω em virtude do lema 3.1. Mas a observação após a definição 3.4 nos garante que, para todo $x \in \Lambda_m^{(d)}$, $\mathcal{A}(\{x\}) \subset \mathcal{A}(\Lambda_m^{(d)})$. Desta forma,

$$P(x) \stackrel{\text{def. 3.6}}{=} P_{\mathcal{A}(\{x\})}(x) \stackrel{\text{lem. 3.2}}{=} P_n(x), \quad \forall x \in \Lambda_m^{(d)}$$

e a prova está concluída. ■

Como os objetos aleatórios $(P_n)_{n \geq 0}$ e P assumem valores no espaço de medida polônês $(\{0, 1\}^{\mathbb{Z}^d}, \mathcal{B}_{\{0,1\}}^{\mathbb{Z}^d})$, a convergência quase-certa implica na convergência em distribuição [11, prop.9 pag.355]. Assim, podemos concluir o seguinte resultado:

Corolário 3.4. Se $(\mu_n)_{n \geq 0}$ e μ são as respectivas distribuições de $(P_n)_{n \geq 0}$ e P em $(\{0, 1\}^{\mathbb{Z}^d}, \mathcal{B}_{\{0,1\}}^{\mathbb{Z}^d})$, então $\mu_n \Rightarrow \mu$.

Antes de encerrarmos esta seção, gostaríamos de enfatizar que a construção da medida limite realizada na definição 3.6 a faz invariante por translações (i.e. estacionária) e ergódica.

Para formalizar este fato, observamos que os elementos aleatórios $(P_n)_{n \geq 0}$ e P estão bem definidos exceto num conjunto de medida nula, i.e. o conjunto dos ω 's em $(0, 1)^{\mathbb{Z}^d}$ que assinalam o mesmo valor numérico a pelo menos dois sítios distintos de $\mathbb{Z}^d$ ou possibilitam a ocorrência de um caminho decrescente infinito. Esta dificuldade pode ser contornada assumindo $P_n = P = 0^{\mathbb{Z}^d}$, $n \geq 0$, por exemplo, neste conjunto *patológico*. Uma vez que isto seja feito, podemos definir a função real (Borel) mensurável f em $((0, 1)^{\mathbb{Z}^d}, \mathcal{B}_{\{0,1\}}^{\mathbb{Z}^d}, \lambda_{\{0,1\}}^{\mathbb{Z}^d})$ por $f(\omega) \stackrel{def}{=} P(\omega)(0)$ e observar que $P(\omega)(x) = f(\theta_x(\omega))$, para todo x in $\mathbb{Z}^d$. Como a medida produto $\lambda_{\{0,1\}}^{\mathbb{Z}^d}$ é ergódica e estacionária em $((0, 1)^{\mathbb{Z}^d}, \mathcal{B}_{\{0,1\}}^{\mathbb{Z}^d})$, assim também o será μ , a distribuição de P , em $(\{0, 1\}^{\mathbb{Z}^d}, \mathcal{B}_{\{0,1\}}^{\mathbb{Z}^d})$. Este tipo de argumento é canônico em teoria ergódica e referimos o leitor a [5, chapt.6] para maiores detalhes.

Desta forma constatamos uma segunda consequência do teorema 3.3:

Corolário 3.5.

O limite termodinâmico μ é estacionário e ergódico em $(\{0, 1\}^{\mathbb{Z}^d}, \mathcal{B}_{\{0,1\}}^{\mathbb{Z}^d})$.

A construção do limite termodinâmico μ realizada nesta seção corresponde ao conceito de *simulação perfeita* no sentido de Fernandez, Ferrari e Garcia [8]. De acordo com esta técnica, a partir de um número finito, ainda que aleatório, de variáveis aleatórias uniformes i.i.d.'s, constrói-se, i.e. simula-se, de acordo com uma lei limite previamente estabelecida, uma janela finita de um objeto aleatório infinito. Além das vantagens óbvias em relação à simulação de *Monte Carlo* usual, onde simulam-se apenas aproximações finitas do limite termodinâmico, esta técnica construtiva é ainda bastante útil como instrumento de demonstrações como as próximas seções comprovarão.

4. UMA LEI FORTE PARA AS DENSIDADES DE OCUPAÇÃO

Em primeiro lugar, formalizaremos o conceito de *densidade de ocupação* aludido na seção 1:

Definição 4.1. Para $n \in \mathbb{N}$, definimos a densidade de ocupação no limite de saturação P_n como sendo a variável aleatória

$$\rho_n(\omega) \stackrel{def}{=} \frac{\sum_{x \in \Lambda_n^{(d)}} P_n(\omega)(x)}{|\Lambda_n^{(d)}| = (2n+1)^d} \quad \text{em } ((0, 1)^{\mathbb{Z}^d}, \mathcal{B}_{\{0,1\}}^{\mathbb{Z}^d}, \lambda_{\{0,1\}}^{\mathbb{Z}^d})$$

□

Como já mencionamos na seção 1, a existência (ou não) do limite $\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E}(\rho_n)$ é uma questão relevante na literatura relativa à *adsorção sequencial aleatória* (ASA). Até recentemente, uma resposta afirmativa era conhecida apenas em modelos unidimensionais [9, 12, 13, 14, 16] ou quase-unidimensionais [1, 2, 7]. Em 2002, Mathew Penrose [15] estabeleceu uma lei fraca dos grandes números (convergência em probabilidade) para a sequência $(\rho_n)_{n \geq 1}$ para uma grande classe de esquemas de exclusão

em $\mathbb{Z}^d$, que se sobrepõe, até certo ponto, à classe de esquemas de exclusão considerados nesta tese.⁸ Naturalmente, esse resultado garante a existência do limite $\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E}(\rho_n)$ mediante uma simples aplicação do *teorema da convergência dominada*. Em nosso caso, nos valeremos da construção executada na seção 3 para obter uma prova simples de uma lei forte dos grandes números (LFGN) para a sequência $(\rho_n)_{n \geq 1}$.

O primeiro passo em direção à esta prova consiste em observar que podemos invocar o *teorema ergódico multiparamétrico* de Wiener [10, Apêndice 14.A] para concluir que

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\sum_{x \in \Lambda_n^{(d)}} P(\omega)(x)}{|\Lambda_n^{(d)}|} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\sum_{x \in \Lambda_n^{(d)}} f \circ \theta_x(\omega)}{(2n+1)^d} = \mathbb{E}(f) \\ (2) \qquad \qquad \qquad &= \mathbb{E}(f \circ \theta_0) = \mathbb{E}(P(0)) \stackrel{\text{def}}{=} \rho \quad \lambda_{(0,1)}^{\mathbb{Z}^d}\text{-q.c.} \end{aligned}$$

para alguma constante $\rho \in [0, 1]$. Esta afirmação sendo possível uma vez que f é (Borel) mensurável e integrável em $((0, 1)^{\mathbb{Z}^d}, \mathcal{B}_{(0,1)}^{\mathbb{Z}^d}, \lambda_{(0,1)}^{\mathbb{Z}^d})$ e a medida produto é estacionária e ergódica em $((0, 1)^{\mathbb{Z}^d}, \mathcal{B}_{(0,1)}^{\mathbb{Z}^d})$.

Seria razoável supor que as discrepâncias entre $P(\omega)|\Lambda_n^{(d)}$ e $P_n(\omega)|\Lambda_n^{(d)}$ seriam devidas a efeitos de fronteira. O próximo lema formaliza esta idéia:

Lemma 4.1. *Se A_n for o evento $\left\{ \mathcal{A}(\Lambda_n^{(d)}) \not\subset \Lambda_{(n+\lfloor \sqrt{n} \rfloor \nu)}^{(d)} \right\}$, então $\mathbb{P}(\limsup A_n) = 0$, i.e. a sequência $(A_n)_{n \geq 1}$ ocorre um número finito de vezes quase-certamente.⁹*

Prova:

Por meio da estimativa (1) obtida no lema 3.1 e considerando a estacionaridade da medida produto conforme enfatizamos na observação após a parte (ii) na prova do lema 3.1, concluímos, por subaditividade, que:

$$\mathbb{P}(A_n) \leq (2n+1)^d \cdot \frac{(2\nu+1)^{d\lfloor \sqrt{n} \rfloor}}{\lfloor \sqrt{n} \rfloor!} := a_n$$

Portanto, pela fórmula de Stirling¹⁰:

$$\mathbb{P}(A_n) \leq a_n \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{(2n+1)^d}{\lfloor \sqrt{n} \rfloor^{1/2}} \cdot \frac{(2\nu+1)^{d\lfloor \sqrt{n} \rfloor}}{\lfloor \sqrt{n} \rfloor^{\lfloor \sqrt{n} \rfloor}} \cdot e^{\lfloor \sqrt{n} \rfloor} := b_n$$

Mas, como $b_n = o(1/n^2)$,¹¹

$$\sum_{n=1}^{\infty} b_n < \infty \Rightarrow \sum_{n=1}^{\infty} a_n < \infty \Rightarrow \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P}(A_n) < \infty.$$

Assim, concluímos a prova aplicando o primeiro lema de Borel-Cantelli. ■

Agora estamos em condições de provar o principal resultado desta seção :

⁸No artigo citado, Penrose trata os processos de estacionamento como *sistemas de partículas interagentes* finitos. Referimos o leitor à seção 6 para uma discussão mais detalhada em relação a este ponto.

⁹ $\lfloor x \rfloor \stackrel{\text{def}}{=} \text{o maior inteiro menor ou igual a } x$.

¹⁰ $n! \simeq n^n e^{-n} \sqrt{2\pi n}$, i.e. $n^n e^{-n} \sqrt{2\pi n}/n! \rightarrow 1$, quando $n \rightarrow \infty$.

¹¹Notação de Landau: $f_n = o(g_n)$ significa que $f_n/g_n \rightarrow 0$, quando $n \rightarrow \infty$.

Teorema 4.2. *Uma lei forte dos grandes números para as densidades de ocupação:*

$$\rho_n \rightarrow \rho \quad \lambda_{(0,1)}^{\mathbb{Z}^d} \text{-q.c.}$$

Prova:

Sabemos pelo lema 4.1 que a última ocorrência de $(A_n)_{n \geq 1}$ é quase certamente finita, ou seja, $\bar{n} = \sup\{n \in \mathbb{N} : A_n \text{ ocorre}\} < \infty$ q.c. Agora, dado $\epsilon > 0$, tome $i \in \mathbb{N}$ suficientemente grande de forma que $i \in [n + \lfloor \sqrt{n} \rfloor \nu, (n+1) + \lfloor \sqrt{n+1} \rfloor \nu)$ para algum $n > \bar{n}$ e tal que $\left(\frac{2(m+1) + \lfloor \sqrt{m+1} \rfloor \cdot 2\nu + 1}{2m+1}\right)^d - 1 < \epsilon$, para todo $m \geq n$.

Portanto $P|_{\Lambda_n^{(d)}} = P_i|_{\Lambda_n^{(d)}}$ pela prova do teorema 3.3.

Desta forma

$$\begin{aligned} \left| \frac{\sum_{x \in \Lambda_i^{(d)}} P(x) - \sum_{x \in \Lambda_i^{(d)}} P_i(x)}{(2i+1)^d} \right| &\leq \frac{\{[(n+1) + \lfloor \sqrt{n+1} \rfloor \nu] \cdot 2\nu + 1\}^d - (2n+1)^d}{(2n+1)^d} \\ &= \left(\frac{2(n+1) + \lfloor \sqrt{n+1} \rfloor \cdot 2\nu + 1}{2n+1} \right)^d - 1 < \epsilon \end{aligned}$$

Ou seja

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \left(\frac{\sum_{x \in \Lambda_i^{(d)}} P(x)}{(2i+1)^d} - \frac{\sum_{x \in \Lambda_i^{(d)}} P_i(x)}{(2i+1)^d} \right) = 0 \quad \text{q.c.}$$

Como $\lim_{i \rightarrow \infty} \frac{\sum_{x \in \Lambda_i^{(d)}} P(x)}{(2i+1)^d} = \rho$ q.c. por (2), segue que $\rho_i = \frac{\sum_{x \in \Lambda_i^{(d)}} P_i(x)}{(2i+1)^d} \rightarrow \rho$ q.c. ■

Como já foi mencionado no início desta seção, basta agora uma simples aplicação do *teorema da convergência limitada* para garantirmos a existência de $\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E}(\rho_n)$. Portanto, estabelecemos o seguinte resultado:

Corolário 4.3. $\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E}(\rho_n) = \rho$

Na seção 6 discutiremos como estimar a constante ρ de maneira rigorosa.

5. COMPORTAMENTO SUPER-EXPONENTIAL

Em primeiro lugar formalizamos o conceito de *super-exponencialidade*:

Definição 5.1. *Dizemos que uma função $f : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{R}$ decresce super-exponencialmente, quando $f(n) = o(e^{-\alpha n})$, $\forall \alpha > 0$, i.e. $\lim_{n \rightarrow \infty} f(n) \cdot e^{\alpha n} = 0$, $\forall \alpha > 0$.* □

Nas literaturas física e química, os *processos de adsorção sequencial aleatória* (ASA) distinguem-se dos chamados *sistemas de equilíbrio* em vários aspectos [6, 18], entre os quais dedicaremos especial atenção ao decaimento super-exponencial das *funções de correlação*, um ponto no qual os modelos de adsorção sequencial aleatória diferem drasticamente dos sistemas de equilíbrio, onde as funções de correlação apresentam decaimento (apenas) exponencial. Embora descrito na literatura especializada [6, 18], uma prova rigorosa deste fenômeno é conhecida apenas em contextos unidimensionais [3].

Nesta tese, o decaimento super-exponencial das funções de correlação será estabelecido a partir da construção do limite termodinâmico μ realizada na seção 3. Isto

equivale a dizer que este fenômeno é uma característica universal de toda a classe de modelos (definidos a partir dos respectivos esquemas de exclusão) estudados aqui, independentemente da dimensão (d) e do raio de interação (ν).

Uma outra característica comum a todos estes modelos é a taxa super-exponencial de convergência ao limite termodinâmico μ . Este ponto será tratado na subseção 5.2.

5.1. Decaimento Super-exponencial das Funções de Correlação. Recordamos que o *coeficiente de correlação* $\sigma_{X,Y}$ entre duas variáveis aleatórias X, Y é definido por $\sigma_{X,Y} = \text{Cov}(X, Y) / (\sigma_X \sigma_Y)$, onde $\text{Cov}(X, Y)$ representa a covariância entre X e Y e σ_X, σ_Y os respectivos desvios-padrão.

Dado um esquema de exclusão, poderíamos perguntar como o status de um sítio $x \in \mathbb{Z}^d$ influenciaria o status de outro sítio $y \in \mathbb{Z}^d$ no limite termodinâmico μ . Desta forma, investigaremos o comportamento assintótico do coeficiente de correlação σ_{xy} entre as variáveis aleatórias $P_x \stackrel{\text{def}}{=} P(x)$ e $P_y \stackrel{\text{def}}{=} P(y)$ conforme a distância $|x - y|_{\text{sup}}$ tender ao infinito. Graças à estacionaridade de μ (corolário 3.5) $\sigma_{xy} = \sigma_{0(y-x)}$, e poderemos supor $x = 0$ sem perda de generalidade.

O resultado principal desta subseção (o teorema 5.1) afirma que σ_{0x} decai super-exponencialmente conforme x tender ao infinito. Mais precisamente, isto quer dizer que $\lim_{x \rightarrow \infty} \sigma_{0x} e^{\alpha|x|} = 0, \forall \alpha > 0$. Para provar o teorema 5.1, será conveniente aumentar (mais precisamente, elevar ao quadrado) o nosso espaço fundamental de probabilidade $\left((0, 1)^{\mathbb{Z}^d}, \mathcal{B}_{(0,1)}^{\mathbb{Z}^d}, \lambda_{(0,1)}^{\mathbb{Z}^d}\right)$. Desta forma, nesta subseção, as nossas

construções serão realizadas no espaço $\left([(0, 1)^2]^{\mathbb{Z}^d}, \mathcal{B}_{(0,1)^2}^{\mathbb{Z}^d}, \lambda_{(0,1)^2}^{\mathbb{Z}^d}\right)$. Neste novo cenário, cada $\tilde{\omega} \in [(0, 1)^2]^{\mathbb{Z}^d}$ poderá ser interpretado como o par ordenado $\tilde{\omega} = (\omega_1, \omega_2)$, onde $\omega_i \in (0, 1)^{\mathbb{Z}^d}, i = 1, 2$.

Neste novo espaço fundamental de probabilidade, definimos os seguintes operadores de projeção assumindo valores no antigo espaço de medida $\left((0, 1)^{\mathbb{Z}^d}, \mathcal{B}_{(0,1)}^{\mathbb{Z}^d}\right)$:

Definição 5.2.

Operadores Cardinais de Projeção :

$$\omega_1(\tilde{\omega}) \stackrel{\text{def}}{=} \omega_1; \quad \omega_2(\tilde{\omega}) \stackrel{\text{def}}{=} \omega_2.$$

Operadores Híbridos de Projeção :

$$\omega_{i,j}^{(n)}(\tilde{\omega})(x) \stackrel{\text{def}}{=} \omega_i(\tilde{\omega})(x) 1_{\{x_1 \leq n\}} + \omega_j(\tilde{\omega})(x) 1_{\{x_1 > n\}}; \quad i, j \in \{1, 2\}, i \neq j, \\ \text{para cada } n \in \mathbb{N} \text{ e considerando a representação canônica } x = (x_1, x_2, \dots, x_d) \text{ de sítios em } \mathbb{Z}^d \text{ como } d\text{-uplas de números inteiros.}^{12}$$

□

Em palavras, a definição 5.2 afirma que $\omega_{i,j}^{(n)}$ atua como ω_i no hiperespaço $\{x_1 \leq n\}$ e como ω_j em $\{x_1 > n\}$.

Segue imediatamente da definição 5.2 acima que todos os operadores de projeção compartilham a mesma distribuição de probabilidade $\lambda_{(0,1)}^{\mathbb{Z}^d}$ em $\left((0, 1)^{\mathbb{Z}^d}, \mathcal{B}_{(0,1)}^{\mathbb{Z}^d}\right)$. Outrossim, $\omega_1 \perp \omega_2$ e $\omega_{1,2}^{(n)} \perp \omega_{2,1}^{(n)}, \forall n \geq 0$.¹³ Consequentemente podemos afirmar

¹² $1_{\{x_1 \leq n\}} = 1$, quando $x_1 \leq n$ e 0, caso contrário...

¹³ $\perp$ significa independência.

que os objetos aleatórios $P(\omega_1)$, $P(\omega_2)$, $P(\omega_{1,2}^{(n)})$, $P(\omega_{2,1}^{(n)})$ compartilham a mesma distribuição de probabilidade μ em $(\{0,1\}^{\mathbb{Z}^d}, \mathcal{B}_{\{0,1\}}^{\mathbb{Z}^d})$ e que $P(\omega_{1,2}^{(n)})$ e $P(\omega_{2,1}^{(n)})$ são independentes, para todo $n \geq 0$, ou seja

$$(3) \quad P(\omega_1) \sim P(\omega_2) \sim P(\omega_{1,2}^{(n)}) \sim P(\omega_{2,1}^{(n)}) \sim \mu, \forall n \geq 0$$

$$(4) \quad P(\omega_{1,2}^{(n)}) \perp P(\omega_{2,1}^{(n)}), \forall n \geq 0$$

Agora estamos em condições de provar o principal resultado desta subseção, qual seja ¹⁴

Teorema 5.1 (Decaimento super-exponencial das funções de correlação).

σ_{0x} decai super-exponencialmente conforme $x \rightarrow \infty$, i.e. $\lim_{x \rightarrow \infty} \sigma_{0x} \cdot e^{\alpha|x|} = 0, \forall \alpha > 0$.

Prova:

Seja $x = (x_1, x_2, \dots, x_d) \in \mathbb{Z}^d$ e suponha a princípio que $x_1 = |x| = \sup_{1 \leq i \leq d} \{|x_i|\}$. Faça $y = \lfloor x_1/2 \rfloor$ e tome o maior $n \in \mathbb{N}$ tal que $2\nu n + 4\nu \leq x_1$, ou seja $n = \lfloor x_1/2\nu \rfloor - 2$. Desta forma ¹⁵ $n\nu + 2\nu \leq y \leq |x| - (n\nu + 2\nu)$.

Agora observe que $\mathcal{A}(\{0\})(\omega_1) \subset B(0, n\nu) \Rightarrow \mathcal{A}(\{0\})(\omega_1) = \mathcal{A}(\{0\})(\omega_{1,2}^{(y)})$. Isto é verdade uma vez que ω_1 e $\omega_{1,2}^{(y)}$ são idênticos à esquerda de y (definição 5.2). Da mesma forma, $\mathcal{A}(\{x\})(\omega_1) \subset B(x, n\nu) \Rightarrow \mathcal{A}(\{x\})(\omega_1) = \mathcal{A}(\{x\})(\omega_{2,1}^{(y)})$. Logo, no evento $E \in \mathcal{B}_{(0,1)^2}^{\mathbb{Z}^d}$, definido por

$$E \stackrel{\text{def}}{=} (\mathcal{A}(\{0\})(\omega_1) \subset B(0, n\nu)) \cap (\mathcal{A}(\{x\})(\omega_1) \subset B(x, n\nu))$$

devemos ter

$$\begin{cases} P(\omega_1)(0) \stackrel{\text{def. 3.6}}{=} P_{\mathcal{A}(\{0\})(\omega_1)}(\omega_1)(0) = P_{\mathcal{A}(\{0\})(\omega_{1,2}^{(y)})}(\omega_{1,2}^{(y)})(0) \stackrel{\text{def. 3.6}}{=} P(\omega_{1,2}^{(y)})(0) \\ P(\omega_1)(x) \stackrel{\text{def. 3.6}}{=} P_{\mathcal{A}(\{x\})(\omega_1)}(\omega_1)(x) = P_{\mathcal{A}(\{x\})(\omega_{2,1}^{(y)})}(\omega_{2,1}^{(y)})(x) \stackrel{\text{def. 3.6}}{=} P(\omega_{2,1}^{(y)})(x) \end{cases}$$

e, portanto

$$(5) \quad P(\omega_1)(0) \cdot P(\omega_1)(x) = P(\omega_{1,2}^{(y)})(0) \cdot P(\omega_{2,1}^{(y)})(x) \quad \text{em } E.$$

Como

$$(6) \quad \mathbb{P}(E^c) \leq 2 \cdot \frac{(2\nu + 1)^{d \cdot n}}{n!}$$

por (1); (5) e (6) implicam em

$$(7) \quad \begin{aligned} & \left| \mathbb{E}[P(\omega_1)(0) \cdot P(\omega_1)(x)] - \mathbb{E}[P(\omega_{1,2}^{(y)})(0) \cdot P(\omega_{2,1}^{(y)})(x)] \right| = \\ & \left| \mathbb{E}[P(\omega_1)(0) \cdot P(\omega_1)(x) - P(\omega_{1,2}^{(y)})(0) \cdot P(\omega_{2,1}^{(y)})(x)] \right| \leq \end{aligned}$$

¹⁴De agora em diante, por simplicidade de notação, escreveremos $|x|$ no lugar de $|x|_{\text{sup}}$, para $x \in \mathbb{Z}^d$.

¹⁵Tenha em mente que ν corresponde ao raio de interação do esquema de estacionamento implícito $S_\nu^{(d)}$.

$$\mathbb{E} \left(\left| (P(\omega_1)(0) \cdot P(\omega_1)(x) - P(\omega_{1,2}^{(y)})(0) \cdot P(\omega_{2,1}^{(y)})(x)) \right| \right) \leq$$

$$\mathbb{P}(E^c) \leq 2 \cdot \frac{(2\nu + 1)^{d \cdot n}}{n!}$$

Entretanto

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[P(\omega_{1,2}^{(y)})(0) \cdot P(\omega_{2,1}^{(y)})(x)] &= \mathbb{E}[P(\omega_{1,2}^{(y)})(0)] \cdot \mathbb{E}[P(\omega_{2,1}^{(y)})(x)] \\ (8) \qquad \qquad \qquad &= \mathbb{E}[P(\omega_1)(0)] \cdot \mathbb{E}[P(\omega_1)(x)] \end{aligned}$$

onde usamos (4) na primeira igualdade e (3) na segunda igualdade. Assim, substituindo (8) em (7), obtemos

$$(9) \quad |\mathbb{E}[P(\omega_1)(0) \cdot P(\omega_1)(x)] - \mathbb{E}[P(\omega_1)(0)] \cdot \mathbb{E}[P(\omega_1)(x)]| \leq 2 \cdot \frac{(2\nu + 1)^{d \cdot n}}{n!}$$

Como $P \circ \omega_1$, definido no novo espaço fundamental de probabilidade $\left([(0, 1)^2]^{\mathbb{Z}^d}, \mathcal{B}_{(0,1)^2}^{\mathbb{Z}^d}, \lambda_{(0,1)^2}^{\mathbb{Z}^d} \right)$, e P , definido no antigo espaço fundamental $\left((0, 1)^{\mathbb{Z}^d}, \mathcal{B}_{(0,1)}^{\mathbb{Z}^d}, \lambda_{(0,1)}^{\mathbb{Z}^d} \right)$, compartilham a mesma distribuição μ em $\left(\{0, 1\}^{\mathbb{Z}^d}, \mathcal{B}_{\{0,1\}}^{\mathbb{Z}^d} \right)$, i.e. $(P \circ \omega_1) \sim P \sim \mu$ (veja a observação feita após a definição 5.2), a desigualdade (9) implica em

$$(10) \quad |\mathbb{E}(P_0 \cdot P_x) - \mathbb{E}(P_0) \cdot \mathbb{E}(P_x)| \leq 2 \cdot \frac{(2\nu + 1)^{d \cdot n}}{n!}$$

Substituindo n em função de $|x|$ como no primeiro parágrafo desta demonstração e observando a definição de covariância entre duas variáveis aleatórias, concluímos finalmente que

$$(11) \quad |\text{Cov}(P_0, P_x)| \leq 2 \cdot \frac{(2\nu + 1)^{d \cdot (\lfloor |x|/2\nu \rfloor - 2)}}{(\lfloor |x|/2\nu \rfloor - 2)!}$$

Neste ponto observamos que nada mudaria nas passagens precedentes, se, no começo desta demonstração, tivéssemos $x_i = \pm|x|$, $1 \leq i \leq d$. Fosse este o caso, uma simples redefinição dos operadores híbridos de projeção $\omega_{1,2}^{(\cdot)}$ e $\omega_{2,1}^{(\cdot)}$ ao longo dos eixos coordenados correspondentes bastaria para restabelecer a desigualdade (11) novamente. Portanto a desigualdade (11) permanece válida para todo $x \in \mathbb{Z}^d$.

Feita esta observação, como

$$\sigma_0^2 \stackrel{\text{def}}{=} \text{Var}(P_0) = \text{Var}(P_x) \stackrel{\text{def}}{=} \sigma_x^2, \quad \forall x \in \mathbb{Z}^d$$

graças à estacionaridade de μ (corolário 3.5), simplesmente fazemos uso da definição de coeficiente de correlação em (11) para estabelecer a desigualdade

$$(12) \quad |\sigma_{0x}| \leq \frac{2}{\sigma_0^2} \cdot \frac{(2\nu + 1)^{d \cdot (\lfloor |x|/2\nu \rfloor - 2)}}{(\lfloor |x|/2\nu \rfloor - 2)!} = o(e^{-\alpha|x|}), \quad \forall \alpha > 0$$

e assim concluir a demonstração. ■

5.2. Velocidade de Convergência ao Limite Termodinâmico. Como P_n essencialmente assume valores no conjunto finito $\{0, 1\}^{\Lambda_n^{(d)}}$, é razoável quantificar a velocidade com que a sequência $(\mu_n)_{n \geq 0}$ converge à medida limite μ estimando quão rapidamente a sequência numérica $|\mu(L) - \mu_n(L)|$ converge para zero, quando L for um conjunto *local*, isto é um conjunto determinado por um número finito de sítios em $\mathbb{Z}^d$.

O conceito de *localidade* pode ser formalizado como segue:

Definição 5.3. Um conjunto $L \in \mathcal{B}_{\{0,1\}^{\mathbb{Z}^d}}$ é dito *local* (ou *cilíndrico*), quando, para algum $m \in \mathbb{N}$, existir um subconjunto $\tilde{L} \subset \{0, 1\}^{\Lambda_m^{(d)}}$ tal que

$$\{0, 1\}^{\mathbb{Z}^d} \ni \omega \in L \Leftrightarrow \{0, 1\}^{\Lambda_m^{(d)}} \ni \omega|_{\Lambda_m^{(d)}} \in \tilde{L}$$

Representaremos por $\mathcal{L}$ a classe dos conjuntos locais em $\mathcal{B}_{\{0,1\}^{\mathbb{Z}^d}}$. $\square$

O próximo teorema estabelece que a convergência numérica mencionada acima ocorre super-exponencialmente rápido.

Teorema 5.2. Se $L \in \mathcal{L}$, então $|\mu(L) - \mu_n(L)| = o(e^{-\alpha n})$, $\forall \alpha > 0$.

Prova:

Sejam $\tilde{L}$ e m como na definição 5.3. Para $n > m$,

$$\mathbb{P}\left(\mathcal{A}(\Lambda_m^{(d)}) \not\subset \Lambda_n\right) \leq (2m+1)^d \cdot \frac{(2\nu+1)^{d \cdot \lceil \frac{n-m}{\nu} \rceil}}{\lceil \frac{n-m}{\nu} \rceil!}$$

por (1) e subaditividade.¹⁶

Entretanto $P|_{\Lambda_m^{(d)}} = P_n|_{\Lambda_m^{(d)}}$ em $\left(\mathcal{A}(\Lambda_m^{(d)}) \subset \Lambda_n\right)$ conforme mostramos na prova do teorema 3.3. Além disso,

$$\mu(L) = \mathbb{P}(\{P \in L\}) = \mathbb{P}(\{P|_{\Lambda_m^{(d)}} \in \tilde{L}\}) = \mathbb{E}\left(1_{\{P|_{\Lambda_m^{(d)}} \in \tilde{L}\}}\right)$$

e

$$\mu_n(L) = \mathbb{P}(\{P_n \in L\}) = \mathbb{P}(\{P_n|_{\Lambda_m^{(d)}} \in \tilde{L}\}) = \mathbb{E}\left(1_{\{P_n|_{\Lambda_m^{(d)}} \in \tilde{L}\}}\right)$$

Portanto

$$\begin{aligned} |\mu(L) - \mu_n(L)| &= \\ \left| \mathbb{E}\left(1_{\{P|_{\Lambda_m^{(d)}} \in \tilde{L}\}} - 1_{\{P_n|_{\Lambda_m^{(d)}} \in \tilde{L}\}}\right) \right| &\leq \\ \mathbb{E}\left(\left|1_{\{P|_{\Lambda_m^{(d)}} \in \tilde{L}\}} - 1_{\{P_n|_{\Lambda_m^{(d)}} \in \tilde{L}\}}\right|\right) &\leq \\ \mathbb{P}\left(\mathcal{A}(\Lambda_m^{(d)}) \not\subset \Lambda_n\right) &\leq (2m+1)^d \cdot \frac{(2\nu+1)^{d \cdot \lceil \frac{n-m}{\nu} \rceil}}{\lceil \frac{n-m}{\nu} \rceil!} \\ &= o(e^{-\alpha n}), \quad \forall \alpha > 0 \end{aligned}$$

■

¹⁶ $\lceil x \rceil \stackrel{\text{def}}{=} \text{o menor inteiro maior ou igual a } x$.

6. ESTIMATIVAS NUMÉRICAS RIGOROSAS E OBSERVAÇÕES FINAIS

Sabemos da seção 4 que

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \rho_i = \rho = \mathbb{E}(P_0) = \mathbb{P}(\{P_0 = 1\}) = 1 - \mathbb{P}(\{P_0 = 0\})$$

Outrossim, a construção realizada na seção 3 mostrou-nos que P_0 é determinado pela ordem relativa de um número (aleatório) super-exponencialmente pequeno¹⁷ das variáveis aleatórias uniformes i.i.d.s $\omega_x, x \in \mathbb{Z}^d$. Portanto, considerando as definições 3.5 e 3.6, é possível identificar por inspeção subconjuntos disjuntos de $\{P_0 = 1\}$ e $\{P_0 = 0\}$ e, assim, estabelecer estimativas inferiores e superiores para ρ .

Elucidamos estas idéias por meio de um exemplo concreto:

Faça $d = 1$, $\nu = 1$ e $S_\nu^{(d)} = S_1^{(1)} = \{(0, 0, 0, \dots)\}$ em acordo com as definições da seção 2. Este cenário corresponde à versão unidimensional do esquema de exclusão de primeiros vizinhos que discutimos na seção 1. Defina r como sendo o menor inteiro não negativo onde um mínimo local com respeito à seqüência $(\omega_i)_{i \geq 0}$ ocorra, isto é $r(\omega) \stackrel{\text{def}}{=} \inf\{i \in \mathbb{Z}_+ : \omega_i < \omega_{i+1}\}$. Analogamente, defina $l(\omega) \stackrel{\text{def}}{=} -\sup\{i \in \mathbb{Z}_- : \omega_{i-1} > \omega_i\}$.

Considere agora a partição $\{E_{ij}; i, j \in \overline{\mathbb{Z}}_+\}$ de $\mathcal{B}_{(0,1)}^{\mathbb{Z}}$ definida por¹⁸

$$E_{ij} \stackrel{\text{def}}{=} \{\omega \in (0, 1)^{\mathbb{Z}} : l(\omega) = i \text{ e } r(\omega) = j\}$$

e faça $p_{ij} = \mathbb{P}(E_{ij})$.

É fácil ver que

$$\{P_0 = 1\} = \{\omega \in (0, 1)^{\mathbb{Z}} : P(\omega)(0) = 1\} = \bigcup_{i,j=0}^{\infty} E_{2i,2j}$$

Portanto

$$\rho = \mathbb{P}(\{P_0 = 1\}) = \sum_{i,j=0}^{\infty} \mathbb{P}(E_{2i,2j}) = \sum_{i,j=0}^{\infty} p_{2i,2j}$$

Como $\mathbb{P}(E_{i,j})$

$$\begin{aligned} &= \frac{i \cdot j}{(i+j+3) \cdot (i+1)! \cdot (j+1)!} + \frac{2}{(i+j+3) \cdot (i+j+2) \cdot (i+j+1) \cdot i! \cdot j!} \\ &+ \frac{1}{(i+j+3) \cdot (i+j+2)} \cdot \left(\frac{i}{(i+1)! \cdot j!} + \frac{j}{(j+1)! \cdot i!} \right) \quad \forall i, j \in \mathbb{Z}_+ \end{aligned}$$

por análise combinatória elementar, é possível gerar estimativas inferiores para ρ somando as primeiras probabilidades com ambos os índices pares e gerar estimativas superiores somando as primeiras probabilidades com ao menos um índice ímpar. Desta forma, obtemos

$$\begin{aligned} 0,4304 &= \sum_{i,j=0}^2 p_{2i,2j} \leq \rho \\ &\leq 1 - \left(\sum_{\substack{0 \leq i \leq 2 \\ 0 \leq j \leq 1}} p_{2i,2j+1} + \sum_{\substack{0 \leq i \leq 1 \\ 0 \leq j \leq 2}} p_{2i+1,2j} + \sum_{0 \leq i,j \leq 1} p_{2i+1,2j+1} \right) = 0,4339 \end{aligned}$$

¹⁷no sentido da desigualdade (1).

¹⁸ $\overline{\mathbb{Z}}_+ \stackrel{\text{def}}{=} \mathbb{Z}_+ \cup \{+\infty\}$.

É interessante observar que estas estimativas estão de acordo com o comportamento assintótico do primeiro momento do número total de partículas adsorvidas calculado por J. K. Mackenzie [13] utilizando meios analíticos como transformadas de Laplace, equações diferenciais, etc...¹⁹

Certamente as facilidades que encontramos neste exemplo não se repetirão em cenários multidimensionais. Mesmo assim, ainda será possível obterem-se estimativas não triviais para ρ no caso de modelos não muito complicados como o esquema de exclusão de primeiros vizinhos bidimensional e, de acordo com o nosso conhecimento, mesmo neste caso, não se conhecem estimativas rigorosas para ρ .

Processos de Estacionamento como Sistemas de Partículas²⁰:

Os processos de estacionamento $P_n, n \geq 0$ ²¹ descritos na definição 2.1 poderiam ser pensados como versões em tempo discreto (i.e. esqueletos) de sistemas de partículas interagentes finitos $(\eta_t^{(n)})_{t \geq 0}$ definidos a partir da condição inicial $\eta_0 = 0^{\mathbb{Z}^d}$ e por taxas $c(x, \eta)$ dadas por

$$c(x, \eta) = 1_{\{x \in \Lambda_n^{(d)}\}} \cdot 1_{\{\theta_x(\eta)|\Lambda_\nu^{(d)} \in S_\nu^{(d)}\}} \quad \forall x \in \mathbb{Z}^d, \eta \in \{0, 1\}^{\mathbb{Z}^d}$$

Não é difícil ver que esse é realmente o caso, desde que $S_\nu^{(d)}$ seja um conjunto decrescente²². (Esta correspondência não é exata, se não for este o caso, uma vez que esquemas de estacionamento não-decrescentes dão origem à processos de estacionamento não-markovianos.)

Neste cenário, é natural definir o sistema de partículas interagentes (infinito) $(\eta_t)_{t \geq 0}$ pelas taxas

$$c(x, \eta) = 1_{\{\theta_x(\eta)|\Lambda_\nu^{(d)} \in S_\nu^{(d)}\}} \quad \forall x \in \mathbb{Z}^d, \eta \in \{0, 1\}^{\mathbb{Z}^d}$$

e a mesma condição inicial $\eta_0 = 0^{\mathbb{Z}^d}$ e construir, ou seja acoplar, a sequência $(\eta_t^{(n)})_{t \geq 0, n \geq 0}$ juntamente com $(\eta_t)_{t \geq 0}$ fazendo uso das mesmas *marcas de Poisson* para concluir que

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \eta_t^{(n)} \stackrel{\text{def}}{=} \eta_\infty^{(n)} \xrightarrow{(n)} \eta_\infty \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{t \rightarrow \infty} \eta_t \quad \text{quase certamente.}$$

Uma vez que a sequência $(\eta_\infty^{(n)})_{n \geq 0}$ é probabilisticamente indistingüível da sequência de limites de saturação $(P_n)_{n \geq 0}$ das seções anteriores (i.e. $(\eta_\infty^{(n)})_{n \geq 0} \sim (P_n)_{n \geq 0}$), podemos interpretar η_∞ como P , “o limite de saturação limite” da seção 3 (definição 3.6).

Certamente este raciocínio é esclarecedor e, em verdade, ele prova de maneira direta a existência do limite termodinâmico μ (ao menos no caso markoviano).

¹⁹Mostra-se nesta referência que $\mathbb{E}(|P_n|) \sim 0,4324 \cdot 2n$ no caso do esquema de exclusão de primeiros vizinhos unidimensional; aqui $|P_n|$ é abreviação para $\sum_{x \in \Lambda_n^{(d)}} P_n(x)$ como na seção 1. Na verdade, Mackenzie pensou em termos de intervalos unitários ao invés de partículas e sítios e fez seus cálculos para o valor esperado do espaço não ocupado no limite de saturação ao invés do valor esperado do número de sítios ocupados. Aqui adaptamos a terminologia de Mackenzie à nossa linguagem.

²⁰Referimos o leitor à resenha de R. Durrett [4] para uma introdução sucinta a este tópico.

²¹Como já alertamos anteriormente, estamos abusando da terminologia e confundindo o limite de saturação P_n com o processo de estacionamento que lhe dá origem.

²²i.e. para $\xi_1, \xi_2 \in S_\nu^{(d)}$, se $\xi_1 \preceq \xi_2$, então $\xi_2 \in S_\nu^{(d)} \Rightarrow \xi_1 \in S_\nu^{(d)}$; onde ‘ $\preceq$ ’ representa a relação de ordem parcial costumeira às configurações de *spin*.

Não obstante, devemos observar que as demonstrações realizadas nas seções 4 e 5 baseiam-se fortemente nas especificidades da construção realizada na seção 3. Dito de outra forma, a simples prova da existência do limite termodinâmico μ não é suficiente para se obterem os demais resultados desta tese.

Processos de Estacionamento com Outras Condições de Fronteira:

Não é difícil ver que, quaisquer que fossem as condições de fronteira utilizadas na definição 2.1, sempre obteríamos o mesmo limite termodinâmico $P \sim \mu$ da definição 3.6. Mais precisamente, se a sequência $(\tilde{P}_n)_{n \geq 1}$ for definida no mesmo espaço de probabilidade fundamental da sequência original $(P_n)_{n \geq 1}$; exatamente como na definição 2.1, com a única exceção de modificarmos o passo (i) para

$$\text{Passo(i)} \quad \tilde{P}_n | \Lambda_n^{(d)} \leftarrow 0^{\Lambda_n^{(d)}}; \quad \tilde{P}_n | \left(\mathbb{Z}^d \setminus \Lambda_n^{(d)} \right) \leftarrow \eta | \left(\mathbb{Z}^d \setminus \Lambda_n^{(d)} \right)$$

para uma configuração arbitrária $\eta \in \{0, 1\}^{\mathbb{Z}^d}$, então teríamos

$$\tilde{P}_n \longrightarrow P \longleftarrow P_n \quad \text{quase certamente.}$$

Para ver isto, basta que modifiquemos ligeiramente o lema 3.2 como segue:

Para cada $\omega \in \{0, 1\}^{\mathbb{Z}^d}$ e $x \in \mathbb{Z}^d$, se $\Lambda_n \supset \mathcal{A}(\{x\})(\omega)$, então $P_{n+\nu}$ e $P_{\mathcal{A}(\{x\})}$ coincidirão sobre $\mathcal{A}(\{x\})$; ou seja $P_{n+\nu} | \mathcal{A}(\{x\}) = P_{\mathcal{A}(\{x\})} | \mathcal{A}(\{x\})$;

e tomar n suficientemente grande no teorema 3.3 de modo a termos $\mathcal{A}(\Lambda_m^{(d)}) \subset \Lambda_{n-\nu}^{(d)}$.

Projeto de Pesquisa

Modelos de Adsorção Sequencial Aleatória Cooperativa

Resumo. Diversos fenômenos em física e química como reações químicas em polímeros, adsorções químicas em superfícies ou em sistemas coloidais e transformações do estado sólido, onde o estudo quantitativo da densidade terminal de partículas adsorvidas e de correlações espaciais representa um estágio importante na compreensão dos mesmos, são adequadamente descritos por *modelos de adsorção sequencial aleatória*. Embora bastante estudados nos últimos vinte anos por procedimentos experimentais, simulações computacionais e métodos teóricos (não rigorosos), resultados matemáticos rigorosos têm se restringido a modelos não-cooperativos unidimensionais.²³

Neste projeto, propomos estender nossos resultados referentes ao modelo não-cooperativo multidimensional - leis fortes para densidades finais de ocupação, decaimento super-exponencial de correlações espaciais, estimativas de grandes desvios, entre outros - para os modelos cooperativos, os quais representam um retrato mais realista dos fenômenos estudados.

Para cada $n \in \mathbb{N} \cup \{\infty\}$, considere os sistemas de partículas interagentes (SPIs) $(\eta_t^{(n)})_{t \geq 0}$ em $\mathbb{Z}^d$ definidos pelas seguintes taxas²⁴

$$c(x, \eta) = \begin{cases} : 0, & \text{se } \begin{cases} : \eta(x) = 1 \text{ ou } x \notin \Lambda_n^{(d)} \stackrel{\text{def}}{=} [-n, \dots, 0, \dots, +n]^d \text{ ou} \\ : \text{o estado do sítio } x \text{ estiver bloqueado na configuração } \eta. \end{cases} \\ : 1, & \text{se } \begin{cases} : \eta(x) = 0, x \in \Lambda_n^{(d)} \text{ e} \\ : \text{o estado do sítio } x \text{ estiver livre na configuração } \eta. \end{cases} \\ : \frac{1}{p}, p \geq 1, & \text{se } \begin{cases} : \eta(x) = 0, x \in \Lambda_n^{(d)} \text{ e} \\ : \text{o estado do sítio } x \text{ estiver semi-bloqueado na configuração } \eta. \end{cases} \end{cases}$$

e condição inicial $\eta_0 = 0^{\mathbb{Z}^d}$.

O significado de livre, semi-bloqueado e bloqueado acima pode ser formalizado como segue: classificamos as configurações locais numa vizinhança de raio ν em $\mathbb{Z}^d$ em três categorias/subconjuntos:

- B_l :: um subconjunto não vazio e crescente de $\{0, 1\}^{\Lambda_\nu^{(d)}}$
- L_{iv} :: um subconjunto não vazio e decrescente de $\{0, 1\}^{\Lambda_\nu^{(d)}}$
- S_{bl} :: um subconjunto (possivelmente vazio) de $\{0, 1\}^{\Lambda_\nu^{(d)}}$

de tal forma que $\{0, 1\}^{\Lambda_\nu^{(d)}} = B_l + L_{iv} + S_{bl}$, onde '+' significa união disjunta.

²³Exceções são descritas no texto principal.

²⁴Veja [4], por exemplo.

Dizemos que o estado do sítio x na configuração η está bloqueado, quando a vizinhança de raio ν de x estiver em B_l . Em símbolos: $\theta_x(\eta)|\Lambda_\nu^{(d)} \in S_{bl}$, onde $\theta_x(\eta)(y) \stackrel{\text{def}}{=} \eta(x+y)$ é o operador de translação em $\mathbb{Z}^d$. Analogamente, definem-se os estados semi-bloqueado e livre.

Num exemplo simples, para algum raio $\nu > 0$, B_l poderia representar as configurações locais com dois ou mais primeiros vizinhos ocupados, L_{iv} as configurações locais com todos os primeiros vizinhos desocupados, enquanto S_{bl} as configurações locais com exatamente um vizinho ocupado.

Não é difícil ver que $\eta_t^{(n)}$ cresce, quando $t \nearrow \infty$, para alguma configuração $\eta_\infty^{(n)}$ em $\{0, 1\}^{\Lambda_n^{(d)}}$, que chamaremos de *limite de saturação* da *região-alvo* $\Lambda_n^{(d)}$.

No caso $n < \infty$, $(\eta_t^{(n)})_{t \geq 0}$ representa um modelo probabilístico para uma classe de processos denominada “*Adsorção Sequencial Aleatória Cooperativa*” nas literaturas física e química. Estes processos modelam, entre outros fenômenos, reações químicas em polímeros, adsorções em superfícies, adsorções em sistemas coloidais e transformações do estado sólido, onde o estudo do comportamento assintótico ($n \rightarrow \infty$) de correlações espaciais e densidades de ocupação no limite de saturação representa um estágio importante para a compreensão destes fenômenos [6, 18].

Apesar de intensamente estudados - sobretudo a partir dos anos 1980 - por procedimentos experimentais, simulações computacionais e métodos teóricos não rigorosos, resultados matemáticos rigorosos estiveram restritos ao modelo não-cooperativo ($S_{bl} = \emptyset$ ou $p = 1$ na descrição acima) unidimensional [9, 13, 12, 16, 14, 3, 7, 1, 2].

Em 2002, Mathew Penrose estabeleceu teoremas centrais do limite e leis fracas dos grandes números para as densidades de ocupação da região-alvo no limite de saturação [15]. Mais precisamente, Penrose provou que existem constantes positivas ρ e σ tais que

$$\begin{aligned} \frac{\sum_{x \in \Lambda_n^{(d)}} \eta_\infty^{(n)}(x)}{|\Lambda_n^{(d)}|} &\xrightarrow[n]{\mathbb{P}} \rho \\ \frac{\sum_{x \in \Lambda_n^{(d)}} (\eta_\infty^{(n)}(x) - \rho)}{\sqrt{|\Lambda_n^{(d)}|}} &\Rightarrow \mathcal{N}(0, \sigma) \end{aligned}$$

Recentemente, apresentamos uma construção explícita para a lei de $\eta_\infty^{(\infty)}$, o limite de saturação do processo de adsorção sequencial aleatória sobre toda a rede $\mathbb{Z}^d$, no caso não-cooperativo [17]. Mais precisamente, descrevemos uma função

$$\begin{aligned} \phi: (0, 1)^{\mathbb{Z}^d} &\longrightarrow \{0, 1\}^{\mathbb{Z}^d} \\ \omega &\longmapsto \phi(\omega) \end{aligned} \quad \text{tal que a lei de } \phi \text{ em } \{0, 1\}^{\mathbb{Z}^d} \text{ é a lei de } \eta_\infty^{(\infty)}, \text{ quando}$$

a lei em $(0, 1)^{\mathbb{Z}^d}$ é o produto de uniformes em $(0, 1)$. Esta construção corresponde à *simulação perfeita* da lei de $\eta_\infty^{(\infty)}$ [8].

Através desta construção pudemos estabelecer os seguintes resultados para os modelos de adsorção sequencial aleatória não-cooperativa:

(i): Lei forte dos grandes números para as densidades de ocupação :

$$\frac{\sum_{x \in \Lambda_n^{(d)}} \eta_\infty^{(n)}(x)}{|\Lambda_n^{(d)}|} \xrightarrow{n} \mathbb{P} \left(\left\{ \eta_\infty^{(\infty)}(0) = 1 \right\} \right) \stackrel{\text{def}}{=} \rho \quad \text{quase certamente.}$$

(ii): Decaimento super-exponencial das funções de correlação no limite termodinâmico:

$$\text{Cov} \left(\eta_\infty^{(\infty)}(0), \eta_\infty^{(\infty)}(x) \right) = o \left(e^{-\alpha \cdot |x|} \right), \quad \forall \alpha > 0, \text{ quando } x \rightarrow \infty.$$

(iii): Velocidade super-exponencial de convergência para o limite termodinâmico: para qualquer evento L , local em $\{0, 1\}^{\mathbb{Z}^d}$,

$$\left| \mathbb{P} \left(\left\{ \eta_\infty^{(\infty)} \in L \right\} \right) - \mathbb{P} \left(\left\{ \eta_\infty^{(n)} \in L \right\} \right) \right| = o \left(e^{-\alpha \cdot n} \right), \quad \forall \alpha > 0, \text{ quando } n \rightarrow \infty.$$

(iv): Um procedimento para obter estimativas superiores e inferiores rigorosas para a densidade de ocupação limite ρ .

Este projeto de pesquisa consiste em estender os resultados descritos acima para os modelos de adsorção seqüencial aleatória cooperativa, incluindo ainda um quinto resultado²⁵:

(v): Estimativas de grandes desvios: $\forall \epsilon > 0$,

$$\mathbb{P} \left(\left\{ \left| \frac{\sum_{x \in \Lambda_n^{(d)}} \eta_\infty^{(n)}(x)}{|\Lambda_n^{(d)}|} - \rho \right| > \epsilon \right\} \right) = o \left(e^{-\alpha \cdot n} \right), \text{ para } n \rightarrow \infty \text{ e algum } \alpha > 0.$$

Naturalmente, (v) é um resultado mais forte que (i), i.e. $(v) \Rightarrow (i)$.

Resultados preliminares sugerem a existência de três fases nos modelos cooperativos: uma fase super-exponencial, para $1 \leq p \leq e$; uma fase exponencial, para $p > e$, mas suficientemente pequeno e uma fase sub-exponencial, para p suficientemente grande.²⁶ Neste caso, a construção mencionada acima - i.e. a simulação perfeita da lei de $\eta_\infty^{(\infty)}$ - e seus conseqüentes resultados ficam restritos às duas primeiras fases.

Acreditamos que o projeto descrito acima resultará nos seguintes artigos:

- (i): “Large Deviation Estimates for Sequential Adsorption Models”
- (ii): “Perfect Simulation of the Thermodynamic Jamming Limit for Cooperative Adsorption Models”.

²⁵trabalho em conjunto com Fábio Prates Machado e Geraldine Góes Bosco.

²⁶As fases aqui descritas são relativas à nossa construção podendo, a princípio, não haver uma correspondência exata (i.e. *sharp*) entre a construção e o modelo. Não obstante, podemos afirmar que haverá uma fase super-exponencial toda vez que $1 \leq p \leq e$.

REFERÊNCIAS

- [1] Baram, A.; Kutasov, D. (1992) *Random sequential adsorption on a quasi-one-dimensional lattice: an exact solution*. J. Phys. A 25, L493.
- [2] Baram, A.; Kutasov, D. (1994) *Random sequential adsorption on a $3 \times \infty$ lattice: an exact solution*. J. Phys. A 27, 3683-3687.
- [3] Bonnier, B.; Boyer, D; Viot, P. (1994) *Pair correlation function in random sequential adsorption process*. J. Phys. A 27, 3671-3682.
- [4] Durrett, R. (1981) *An Introduction to Infinite Particle Systems*. Stochastic Processes and their Applications 11, 109-150.
- [5] Durrett, R. (1996) *Probability: theory and examples*. Second edition. Duxbury Press.
- [6] Evans, J. W. (1993) *Random and cooperative adsorption*. Rev. Modern Phys. 65, 1281-1329.
- [7] Fan Y.; Percus J. K. (1992) *Random sequential adsorption on a ladder* J. Stat. Phys. 66, 263.
- [8] Ferrari, P. A.; Fernandez R.; Garcia, N. L. (2002) *Perfect simulation for interacting point processes, loss networks and Ising models*. Stochastic Processes and their Applications 102, 63-88.
- [9] Flory, P. J. (1939) *Intramolecular reaction between neighboring substituents of vinyl polymers*. J. Am. Chem. Soc. 61, 1518.
- [10] Georgii, H. O. (1988) *Gibbs measures and phase transitions*. de Gruyter Studies in Mathematics 9.
- [11] Fristedt, B.; Gray, L. (1997) *A modern approach to probability theory*. Birkhäuser.
- [12] Keller, J. B. (1962) *Reactions kinetics of a long chain molecule*. J. Chem. Phys. 37, 2584.
- [13] Mackenzie, J. K. (1962) *Sequential filling of a line by intervals placed at random and its application to linear adsorption*. J. Chem. Phys. 37, 723.
- [14] Page, E. S. (1959) *The distributions of vacancies on a line*. J. Royal Statist. Soc. B 21, 364-374.
- [15] Penrose, M. D. (2002) *Limit theorems for monotonic particle systems and sequential deposition*. Stochastic Processes and their Applications 98, 175-197.
- [16] Rényi, A. (1963) *On a one-dimensional problem concerning random space filling*. Sel. Trans. Math. Stat. Prob. 4, 203.
- [17] Ritchie, T. L. (2005) *Construction of the thermodynamic jamming limit for the parking process and other exclusion schemes on $\mathbb{Z}^d$* . Journal of Statistical Physics, Vol. xxx, Nos. x/x, xxxx 2005 (DOI: 10.1007/s10955-005-8025-7).
- [18] Talbot, J.; Tarjus, G.; Van Tassel, P. R.; Viot, P. (2000) *From car parking to protein adsorption: an overview of sequential adsorption processes*. Colloids Surf. A 165, 287-324.

INSTITUTO DE MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA, UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, RUA DO MATÃO
1010, CEP 05508-900, SÃO PAULO SP, BRAZIL
E-mail address: thomasl@ime.usp.br