Simulação perfeita e aproximações de alcance finito em sistemas de *spins* com interações de longo alcance

Estéfano Alves de Souza

Tese apresentada
ao
Instituto de Matemática e Estatística
da
Universidade de São Paulo
para
obtenção do título
de
Doutor em Ciências

Programa: Estatística
Orientador: Prof. Antonio Galves

Durante o desenvolvimento deste trabalho o autor recebeu auxílio financeiro do CNPq

São Paulo, maio de 2013

Simulação perfeita e aproximações de alcance finito em sistemas de *spins* com interações de longo alcance

Esta versão da Tese contém as correções e alterações sugeridas pela Comissão Julgadora durante a defesa da versão original do trabalho, realizada em 26/03/2013. Uma cópia da versão original está disponível no Instituto de Matemática e Estatística da Universidade de São Paulo.

Comissão Julgadora:

- Prof. Antonio Galves (orientador) – IME-USP
- Prof. Dr. Eduardo Jordão Neves – IME-USP
- Prof. Dr. Pierre Collet – CNRS - França
- Prof. Dr. Roberto Imbuzeiro Moraes Felinto de Oliveira – IMPA
- Prof. Dr. Domingos Humberto Urbano Marchetti – IF-USP

Agradecimentos

Em primeiro lugar, quero agradecer ao meu orientador Antonio Galves que desde 2007 (quando também orientou o meu Mestrado) vem sendo uma pessoa extremamente compreensiva comigo – mais até do que realmente mereço, para ser sincero – e de quem recebi lições importantes para a continuidade de minha carreira acadêmica. Por sua excelente estrutura e ambiente de trabalho, o Núcleo de Modelagem Estocástica e Complexidade (NUMEC-USP), coordenado pelo Prof. Galves, também merece uma menção especial.

Também quero agradecer a três pessoas que colaboraram de forma significativa para que esta Tese fosse concluída: a Daniel Takahashi pelas discussões sobre modelos de Ising e análise estatística de dados ligados à Neurociência; a Eva Löcherbach pelas observações sobre simulação perfeita e, principalmente, a Roberto Fernández pelas sugestões e comentários adicionais sobre estados de Gibbs e transição de fase durante sua última visita ao NUMEC-USP, em janeiro de 2013, quando esta Tese se encontrava em fase final de redação.

Não poderia esquecer também dos amigos de NUMEC, que foram fundamentais não apenas nas discussões que levaram a esta Tese mas também pelos ótimos momentos de descontração nas (poucas) horas vagas disponíveis: Rodrigo Lambert, Manuel González, Gabriel Peixoto, Douglas Pinto, Bruno Monte, Alejandra Rada, Karina Yaginuma, Renata Khouri, Lina Thomas, Andressa Cerqueira e por aí vai – não conseguiria citar todo mundo em apenas uma ou duas páginas. E, claro, não posso me esquecer da Lourdes, secretária do NUMEC e uma pessoa incrível.

Agradeço também a Florencia Leonardi, Miguel Abadi, Eduardo Jordão Neves, Fábio Machado, Vladimir Belitsky e a todos os professores do NUMEC. Outros professores que passaram pelo Núcleo, como Eugene Pechersky e Yuri Suhov, também merecem ser mencionados por aqui.

A todos os meus amigos e familiares: meu MUITO OBRIGADO. E, acima de tudo, obrigado aos meus pais, que apesar de todas as dificuldades nestas quase três décadas, me ensinaram muita coisa, são parte importante da minha vida e é mais do que justo dividir esta etapa concluída de minha carreira acadêmica com eles.

Resumo

SOUZA, E. A. **Simulação perfeita e aproximações de alcance finito em sistemas de *spins* com interações de longo alcance**. 2013. 41 p. Tese (Doutorado) - Instituto de Matemática e Estatística, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2013.

Nosso objeto de estudo são os sistemas de *spins* com interações de longo alcance; em particular, estamos interessados em sistemas cuja probabilidade invariante é o modelo de Ising em A^S, onde $A = \{-1, 1\}$ é o espaço de *spins* e $S = \mathbb{Z}^d$ é o espaço de sítios. Apresentamos dois resultados originais que são consequências da aplicação de algoritmos de simulação perfeita e de acoplamento no contexto da construção deste tipo de sistemas e de suas respectivas probabilidades invariantes.

Palavras-chave: Modelo de Ising, Sistemas Markovianos de Partículas, Simulação Perfeita, Acoplamento.

Abstract

SOUZA, E. A. **Perfect simulation and finite-range approximations in spin systems with long-range interactions**. 2013. 41 p. Tese (Doutorado) - Instituto de Matemática e Estatística, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2013.

Our object of interest are spin systems with long-range interactions. As a special case, we are interested in systems whose invariant measure is the Ising model on A^S, where $A = \{-1, 1\}$ is the space of spins and $S = \mathbb{Z}^d$ is the space of sites. We present two original results that are byproducts of the application of Perfect Simulation and Coupling algorithms in the context of the construction of these spin systems and their respective invariant measures.

Keywords: Ising Model, Interacting Particle Systems, Perfect Simulation, Coupling.

Sumário

Capítulo 1

Introdução

A classe dos sistemas Markovianos de partículas interagentes é uma família de processos estocásticos que, em termos de teoria de Probabilidade, começou a ser estudada no final da década de 1960: alguns dos primeiros artigos que estudaram esta família de processos foram escritos pelo norte-americano Frank Spitzer (1969, 1970) e o russo R.L. Dobrushin (1971). O objetivo inicial deste estudo era descrever e analisar modelos estocásticos para evoluções espaço-temporais em espaços finitos ou infinitos enumeráveis e nos quais havia a possibilidade de se incluir interações de longo alcance ou mesmo de *alcance infinito*, ou seja, entre dois pontos arbitrariamente distantes que interagem entre si.

Naturalmente, a motivação original para o estudo destes modelos vinha da Mecânica Estatística e sua análise também tornou-se importante para uma compreensão mais ampla do fenômeno de *transição de fase* nos *estados de Gibbs*. Com o tempo, notou-se que este tipo de estrutura poderia ser formulada, de uma forma igualmente natural, em outras linhas de pesquisa, como redes neuronais e modelos de infecção. Liggett (1985) é uma das principais referências sobre a teoria de sistemas Markovianos de partículas.

1.1 Sistemas com interações de longo alcance

Nesta Tese, nosso objeto de estudo são os chamados sistemas de *spins* com interações de longo alcance, que nada mais são do que sistemas Markovianos de partículas com *infinitas componentes*, ou seja, processos que assumem valores em uma configuração definida em um conjunto infinito enumerável S na qual cada componente (ou seja, cada ponto de S) assume um valor definido em um conjunto (*a priori*) binário A. Tipicamente, define-se $S = \mathbb{Z}^d$ para algum inteiro positivo $d \geq 1$ e $A = \{-1, 1\}$; portanto, dizemos que cada ponto de S recebe um *spin*. Tais processos são construídos de tal forma que sejam reversíveis – e, portanto, invariantes – com respeito a uma medida de probabilidade em A^S cuja lei é caracterizada por *interação entre sítios*, ou seja, uma família de números reais J indexada por subconjuntos finitos de sítios $R \subset S$ de tal forma que $J_R \neq 0$ indica a existência de interação entre os sítios de R. A este tipo de medidas dá-se o nome de *medidas de Gibbs* (do Inglês, *Gibbs measures*).

Um caso particular de medida de Gibbs é o *modelo de Ising com interações de alcance infinito*, ou seja, a interação J é definida para pares de sítios $(i, j) \in S \times S$ com $||i - j||$ tão grande quanto quisermos. Tal modelo terá suporte no conjunto de configurações infinitas A^S, onde $A = \{-1, 1\}$ e

$S = \mathbb{Z}^d$. Dizemos que (i, j) é um par de sítios interagentes se e somente se $J(i, j) \neq 0$. O grafo de sítios interagentes relativo à interação J é o conjunto de pares (i, j) tais que $J(i, j) \neq 0$.

Como um exemplo que visa justificar o interesse por processos com interações de longo alcance, podemos citar a influência de variáveis externas na observação de uma cadeia de Markov de alcance fixo (Collet e Leonardi, 2012) ou mesmo uma cadeia estocástica com memória de alcance variável (Collet, Galves e Leonardi, 2008): ao introduzirmos, de forma conveniente, uma sequência estocástica que funciona como um "ruído" que pode alterar o valor da sequência original, observa-se que as cadeias observadas se comportam como uma cadeia estocástica com memória de ordem infinita (e, portanto, de alcance infinito).

Ainda assim, sob algumas condições de continuidade e de "perda de memória" ao longo do tempo, podemos reescrever a probabilidade de transição de uma cadeia estocástica de ordem infinita como uma combinação linear convexa de probabilidades de transição de cadeias de Markov de alcances finitos. Este tipo de decomposição possibilita a construção explícita de processos com longo alcance a partir de processos de alcance finito e simplifica a construção de algoritmos de simulação perfeita para a respectiva probabilidade invariante. Comets, Fernández e Ferrari (2002) é uma das principais referências para este tipo de decomposição que, por sua vez, está diretamente relacionada com o trabalho de Bramson e Kalikow (1993) – daí vem o nome *decomposição de Kalikow* que adotaremos em nosso contexto.

Em termos de simulação e de análise estatística de dados, não podemos observar mais do que a projeção, em um conjunto finito de sítios, de uma distribuição de probabilidade em $A^{\mathbb{Z}^d}$. Por este motivo, torna-se importante estimar, por meio de algum acoplamento, a probabilidade de discrepância entre o modelo de Ising com interações de alcance infinito e sua versão restrita a um conjunto finito F (ou seja, $J(i, j) = 0$ se pelo menos um dos sítios não pertence a F), tanto do ponto de vista da medida de probabilidade em si quanto do ponto de vista temporal, ou seja, estimando essa probabilidade de discrepância ao longo do tempo e em uma condição de equilíbrio (regime estacionário). O primeiro ponto de vista já foi parcialmente abordado por Galves, Löcherbach e Orlandi (2010), que obtiveram uma quota superior para a distância $\bar{d}$ entre o modelo de Ising e sua versão truncada no alcance L (ou seja, $J(i, j) = 0$ se $||i - j|| > L$), restrita a subconjuntos finitos de $\mathbb{Z}^d$. Nosso objetivo principal é apresentar resultados originais que ajudem a incrementar a percepção sobre estes dois pontos de vista distintos.

1.2 Contribuições

Nesta Tese, apresentaremos dois resultados originais:

- O primeiro deles, o Teorema 4.2.1 (*Teorema de Correção em Volume Finito*), consiste em uma quota superior para a distância $\bar{d}$ entre o modelo de Ising de alcance infinito e sua versão restrita a um subconjunto finito de $\mathbb{Z}^d$.

- Por sua vez, nosso segundo resultado original, o Teorema 5.2.1 (*Teorema de Aproximação Empírica*), mostra que, sob certas hipóteses, é possível acoplar duas dinâmicas estocásticas de Ising em regime estacionário $(X_s)_{s\in\mathbb{R}}$ e $(X_s^{[L]})_{s\in\mathbb{R}}$ de tal forma que é possível controlar a proporção de tempo em que ambos os processos se diferenciam em uma janela de tempo finita. Os processos $(X_s)_{s\in\mathbb{R}}$ e $(X_s^{[L]})_{s\in\mathbb{R}}$ são dois sistemas de *spins* em tempo contínuo, assumindo

valores em A^S e tais que suas probabilidades reversíveis correspondem ao modelo de Ising em e sua versão truncada no alcance L, respectivamente.

Ambos os resultados são demonstrados sob condições de *alta temperatura*, de forma que há ausência de transição de fase, ou seja, a escolha da interação J leva a uma única probabilidade invariante para o sistema de *spins*.

1.3 Organização da Tese

Esta Tese está organizada da seguinte forma:

- No Capítulo 2, definimos o modelo de Ising e sua respectiva dinâmica estocástica.
- No Capítulo 3, discutimos alguns resultados conhecidos que garantem a existência de um algoritmo de simulação perfeita para obter uma realização do modelo de Ising e as consequências para a construção do respectivo processo estocástico ao longo de um intervalo de tempo finito.
- O acoplamento entre as dinâmicas estocásticas ao longo de um intervalo de tempo finito, além da demonstração do Teorema 4.2.1, são os tópicos apresentados no Capítulo 4.
- O Capítulo 5 é dedicado à demonstração do Teorema 5.2.1, utilizando o conceito de sequências fortemente misturadoras.
- Finalmente, no Capítulo 6 fazemos alguns comentários finais.

Capítulo 2

O modelo de Ising e sua dinâmica estocástica

Neste capítulo, definimos o modelo de Ising em $\mathbb{Z}^d$ e sua versão de alcance finito (ou, simplesmente, *truncada*); isso será feito na Seção 2.1. A seguir, na Seção 2.2, apresentamos os geradores infinitesimais de dois processos de Markov em tempo contínuo que têm os dois modelos como as respectivas medidas de probabilidades reversíveis. Finalmente, na Seção 2.3, apresentamos uma decomposição das taxas destas dinâmicas estocásticas que será conveniente para a definição dos algoritmos de simulação perfeita e do acoplamento das duas dinâmicas.

2.1 Definições preliminares

Nesta seção, vamos introduzir algumas notações fundamentais. Sejam $A = \{-1, 1\}$ o espaço de *spins* e $S = A^{\mathbb{Z}^d}$ o espaço de configurações. Definimos a norma L^1 em $\mathbb{Z}^d$:

$$||i|| := \sum_{k=1}^{d} |i_k| \,,$$

em que $i = (i_1, \ldots, i_d) \in \mathbb{Z}^d$. Toda configuração em S será representada por letras gregas: σ, η, $\ldots$, por exemplo.

Um ponto $i \in \mathbb{Z}^d$ será denominado *sítio* e, para todo sítio i, a notação $\sigma(i)$ será usada para representar o valor (*spin*) da configuração σ no sítio i. Por extensão, para qualquer subconjunto $V \subset \mathbb{Z}^d$, $\sigma(V) \in A^V$ representará a restrição de σ para o conjunto de sítios em V. Se V é finito, denotamos sua cardinalidade por $|V|$.

Finalmente, para todo $i \in \mathbb{Z}^d$ e todo número inteiro $L \geq 1$, definimos

$$B_i(L) = \{j \in \mathbb{Z}^d : ||j - i|| \leq L\} \tag{2.1}$$

e para todo $i \in \mathbb{Z}^d$ e todo $\sigma \in S$, definimos a configuração modificada $\sigma^i \in S$:

$$\sigma^i(j) = \begin{cases} \sigma(j)\,, & \text{se } j \neq i \\ -\sigma(i)\,, & \text{se } j = i\,. \end{cases}$$

A definição formal de interação vem a seguir.

Definição 2.1.1 *Uma interação é uma coleção* $J = \{J(i,j),\, (i,j) \in \mathbb{Z}^d \times \mathbb{Z}^d\}$ *de números reais indexados por pares* $(i,j) \in \mathbb{Z}^d \times \mathbb{Z}^d$ *que satisfaz as seguintes condições:*

1. $J(i,i) = 0$ *para todo* $i \in \mathbb{Z}^d$*;*
2. $J(i,j) = J(j,i)$ *para todo* $i \neq j$ *(grafo não orientado);*
3. *Condição de soma uniforme:*

$$\epsilon := \sup_{i \in \mathbb{Z}^d} \sum_{j \in \mathbb{Z}^d} |J(i,j)| < \infty\,. \tag{2.2}$$

Finalmente, apresentamos o modelo de Ising com respeito à interação J e sua versão truncada:

Definição 2.1.2 *Uma medida de probabilidade* μ *em* S *é chamada de modelo de Ising com respeito à interação* $J = \{J(i,j),\, (i,j) \in \mathbb{Z}^d \times \mathbb{Z}^d\}$ *se para todo* $i \in \mathbb{Z}^d$*, para todo* $a \in A$ *e para todo* $\eta \in S$*, uma versão da probabilidade condicional* $\mu(\{\sigma : \sigma(i) = a \,|\, \sigma(j) = \eta(j) \text{ para todo } j \neq i\})$ *é dada por*

$$\begin{aligned} &\mu(\{\sigma : \sigma(i) = a \,|\, \sigma(j) = \eta(j) \text{ para todo } j \neq i\}) \\ &\qquad = \frac{1}{1 + \exp\Big\{2a \sum_{j \in \mathbb{Z}^d} J(i,j)\eta(j)\Big\}}\,. \end{aligned} \tag{2.3}$$

Analogamente, dizemos que a medida de probabilidade $\mu^{[L]}$ *em* S *é o modelo de Ising com respeito à interação* J *truncada no nível* L *se para todo* $i \in \mathbb{Z}^d$*, para todo* $a \in A$*, e para todo* $\eta \in S$*, uma versão da probabilidade condicional* $\mu^{[L]}(\{\sigma : \sigma(i) = a \,|\, \sigma(j) = \eta(j) \text{ para todo } j \neq i\})$ *é dada por*

$$\begin{aligned} &\mu^{[L]}(\{\sigma : \sigma(i) = a \,|\, \sigma(j) = \eta(j) \text{ para todo } j \neq i\}) \\ &\qquad = \frac{1}{1 + \exp\Big\{2a \sum_{j \in \mathbb{Z}^d : j \in B_i(L)} J(i,j)\eta(j)\Big\}}\,. \end{aligned} \tag{2.4}$$

2.2 Dinâmicas estocásticas de Ising

Definimos agora uma dinâmica estocástica que tem μ como medida reversível (tal dinâmica também é conhecida como *dinâmica de Glauber*): trata-se de um sistema Markoviano de partículas interagentes $(X_t(i), i \in \mathbb{Z}^d, t \in \mathbb{R})$ que assume valores em S e é definido pela taxa $c_i(\sigma)$ com a qual a configuração (*spin*) no sítio $i \in \mathbb{Z}^d$ troca de sinal quando a configuração do sistema é igual a $\sigma \in S$:

$$c_i(\sigma) = \exp\Big(-\beta \sum_{j \in \mathbb{Z}^d} J(i,j)\sigma(i)\sigma(j)\Big)\,, \tag{2.5}$$

onde $\beta > 0$ é uma constante. O gerador infinitesimal $\mathcal{G}$ do processo $(X_t)_t$ é definido nas funções cilíndricas $f : S \to \mathbb{R}$ da seguinte forma:

$$\mathcal{G}f(\sigma) = \sum_{i\in\mathbb{Z}^d} c_i(\sigma)[f(\sigma^i) - f(\sigma)]\,. \tag{2.6}$$

Observe que a condição de soma uniforme (2.2) implica diretamente que as taxas $c_i(\sigma)$ são limitadas uniformemente em i e σ; além disso, temos que

$$\sup_{i\in\mathbb{Z}^d} \sum_{j\in\mathbb{Z}^d} \sup_{\sigma\in S} |c_i(\sigma) - c_i(\sigma^j)| < \infty\,. \tag{2.7}$$

Sob as condições (2.2) e (2.7), o Teorema 3.9 do Capítulo I de Liggett (1985) implica que $\mathcal{G}$ é, de fato, o gerador infinitesimal de um processo de Markov $(X_t)_t$. Além disso, por construção, este processo tem o modelo de Ising μ correspondente à interação $J^\beta(i,j) := \beta J(i,j)$ como medida reversível: de fato, como

$$\frac{c_i(\eta)}{c_i(\eta^i)} = \frac{\mu(\{\sigma : \sigma(i) = \eta(i)\,|\,\sigma(j) = \eta(j) \text{ para todo } j \neq i\})}{\mu(\{\sigma : \sigma(i) = -\eta(i)\,|\,\sigma(j) = \eta(j) \text{ para todo } j \neq i\})}\,,$$

a Proposição 2.7 do Capítulo IV de Liggett (1985) garante que $(X_t)_t$ é reversível com respeito a μ.

Para um número inteiro $\ell \geq 1$ fixado, definimos uma nova dinâmica estocástica de Ising tendo $\mu^{[\ell]}$ como medida reversível: seja $(X_t^{[\ell]})_{t\in\mathbb{R}}$ um processo de Markov assumindo valores em S com gerador infinitesimal

$$\mathcal{G}^{[\ell]}f(\sigma) = \sum_{i\in\mathbb{Z}^d} c_i^{[\ell]}(\sigma)[f(\sigma^i) - f(\sigma)]\,, \tag{2.8}$$

onde as taxas $c_i^{[\ell]}$ são dadas por

$$c_i^{[\ell]}(\sigma) = r_i^{[\ell]} \exp\Big(-\beta \sum_{j\in B_i(\ell)} J(i,j)\sigma(i)\sigma(j)\Big)\,, \tag{2.9}$$

onde

$$r_i^{[\ell]} = \exp\Big(-\beta \sum_{j\notin B_i(\ell)} |J(i,j)|\Big)\,.$$

A próxima proposição garante que $\mu^{[\ell]}$ é uma medida reversível do processo $(X_t^{[\ell]})_t$.

Proposição 2.2.1 *O processo $(X_t^{[\ell]})_t$ é reversível com respeito ao modelo de Ising $\mu^{[\ell]}$ de interação J^β truncada no alcance ℓ.*

Demonstração. Por construção, temos que

$$\frac{c_i^{[\ell]}(\eta)}{c_i^{[\ell]}(\eta^i)} = \frac{\mu^{[\ell]}(\{\sigma : \sigma(i) = \eta(i)\,|\,\sigma(j) = \eta(j) \text{ para todo } j \neq i\})}{\mu^{[\ell]}(\{\sigma : \sigma(i) = -\eta(i)\,|\,\sigma(j) = \eta(j) \text{ para todo } j \neq i\})}\,.$$

Portanto, pela Proposição 2.7 do Capítulo IV de Liggett (1985), temos que $(X_t^{[\ell]})_t$ é reversível com respeito a $\mu^{[\ell]}$. •

Observe que o termo extra $r_i^{[\ell]}$ aparece na definição das taxas $c_i^{[\ell]}$ em comparação à definição das taxas c_i. Este termo é importante do ponto de vista da construção simultânea (ou, simplesmente, um *acoplamento*) dos processos X_t e $X_t^{[\ell]}$, mas não muda a evolução do processo de Markov original quando este está em regime estacionário, como foi demonstrado na Proposição 2.2.1.

Nosso objetivo principal é demonstrar que podemos construir simultaneamente (ou simplesmente, *acoplar*) as duas dinâmicas estocásticas de Ising ao longo do tempo e de tal forma que a probabilidade de discrepância entre os valores das dinâmicas possa ser controlada de forma conveniente.

2.3 Decomposição de Kalikow

Tal acoplamento é baseado em uma decomposição das taxas de transição $c_i(\sigma)$ e $c_i^{[\ell]}(\sigma)$ como combinações lineares convexas de taxas de transição de alcances finitos. Chamaremos este tipo de decomposição, ao longo desta Tese, de *decomposição de Kalikow*.

Como feito em Galves et al. (2010) com o objetivo de apresentar esta decomposição, introduziremos a seguinte notação: Definimos, para cada $i \in \mathbb{Z}^d$,

$$M_i = 2e^{\beta \sum_{j\in\mathbb{Z}^d} |J(i,j)|}$$

e a probabilidade $(\lambda_i(k))_{k\geq 0}$ no conjunto $\{0,1,2,\ldots\}$

$$\lambda_i(k) = \begin{cases} e^{-2\beta \sum_{j\in\mathbb{Z}^d} |J(i,j)|} & \text{se } k=0\,, \\ e^{-\beta \sum_{j\notin B_i(1)} |J(i,j)|} - e^{-2\beta \sum_{j\in\mathbb{Z}^d} |J(i,j)|} & \text{se } k=1\,, \\ e^{-\beta \sum_{j\notin B_i(k)} |J(i,j)|} - e^{-\beta \sum_{j\notin B_i(k-1)} |J(i,j)|} & \text{se } k>1\,. \end{cases}$$

Para todo $\sigma \in S$ e para todo $k \geq 2$, definimos as probabilidades de transição

$$\begin{aligned} p_i^{[k]}(-\sigma(i)|\sigma) = {} & \frac{1}{M_i} e^{-\beta \sum_{j\in B_i(k-1)} J(i,j)\sigma(i)\sigma(j)} \\ & \times \frac{e^{-\beta \sum_{j:||i-j||=k} J(i,j)\sigma(i)\sigma(j)} - e^{-\beta \sum_{j:||i-j||=k} |J(i,j)|}}{1 - e^{-\beta \sum_{j:||i-j||=k} |J(i,j)|}}\,, \end{aligned}$$

e para $k=1$,

$$p_i^{[1]}(-\sigma(i)|\sigma) = \frac{1}{M_i} \frac{e^{-\beta \sum_{j:||i-j||=1} J(i,j)\sigma(i)\sigma(j)} - e^{-\beta \sum_{j:||i-j||=1} |J(i,j)|}}{1 - e^{-2\beta \sum_{j:||i-j||=1} |J(i,j)|} e^{-\beta \sum_{j\notin B_i(1)} |J(i,j)|}}\,.$$

Para termos uma medida de probabilidade em A, definimos para todo $k \geq 1$,

$$p_i^{[k]}(\sigma(i)|\sigma) = 1 - p_i^{[k]}(-\sigma(i)|\sigma)\,.$$

Finalmente, para $k=0$, definimos

$$p_i^{[0]}(1) = p_i^{[0]}(-1) = \frac{1}{2}\,.$$

Observe que esta última probabilidade não depende do sítio i. Além disso, note que, por constru-

ção, para todo $k \geq 1$, as probabilidades $p_i^{[k]}(a|\sigma)$ dependem apenas de $\sigma(B_i(k))$. Por este motivo escreveremos, de forma indiferente, $p_i^{[k]}(a|\sigma(B_i(k)))$ em vez de $p_i^{[k]}(a|\sigma)$ para $k \geq 1$ deste ponto em diante.

Agora, apresentamos o teorema da decomposição de Kalikow das taxas.

Teorema 2.3.1 *(Galves et al., 2010) Supondo que a condição de soma uniforme (2.2) vale, temos que:*

1. *A sequência $(\lambda_i(k))_{k\geq 0}$ define uma distribuição de probabilidade no conjunto $\{0, 1, 2, \ldots\}$.*

2. *Para quaisquer $\ell \geq 1$ e $\sigma \in S$, temos que*

$$c_i^{[\ell]}(\sigma) = M_i \left[\lambda_i(0)\frac{1}{2} + \sum_{k=1}^{\ell} \lambda_i(k) p_i^{[k]}(\sigma(i)|\sigma(B_i(k))) \right]. \tag{2.10}$$

3. *Para todo $\sigma \in S$, temos que*

$$c_i(\sigma) = M_i \left[\lambda_i(0)\frac{1}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_i(k) p_i^{[k]}(\sigma(i)|\sigma(B_i(k))) \right]. \tag{2.11}$$

Demonstração. O item 1 segue diretamente da definição e de (2.2).

Para provar o item 2, defina

$$c_i^{[0]}(\sigma) = \frac{1}{2} M_i \lambda_i(0)$$

e observe que, para todo $\ell \geq 1$, vale que

$$c_i^{[\ell]}(\sigma) = \sum_{k=1}^{\ell} [c_i^{[k]}(\sigma) - c_i^{[k-1]}(\sigma)] + c_i^{[0]}(\sigma)\,,$$

onde as diferenças $c_i^{[k]}(\sigma) - c_i^{[k-1]}(\sigma)$ são positivas. Por definição, como

$$c_i^{[k]}(\sigma) - c_i^{[k-1]}(\sigma) = M_i \lambda_i(k) p_i^{[k]}(-\sigma(i)|\sigma(B_i(k)))\,.$$

obtemos a decomposição do item 2.

Finalmente, para demonstrar o item 3, observe que a condição de soma uniforme (2.2) implica que

$$\lim_{k\to\infty} c_i^{[k]}(\sigma) = c_i(\sigma)\,, \tag{2.12}$$

uma vez que $r_i^{[k]} \to 1$ para $k \to \infty$. Portanto, levando o item 2 em consideração, chegamos à decomposição desejada. •

Com o intuito de apresentar os algoritmos de simulação perfeita e o acoplamento das dinâmicas estocásticas, torna-se conveniente reescrever o gerador infinitesimal (2.6) da seguinte forma:

$$\mathcal{G}f(\sigma) = \sum_{i\in\mathbb{Z}^d} \sum_{a\in A} c_i(a|\sigma)[f(\sigma^{i,a}) - f(\sigma)]\,, \tag{2.13}$$

onde $\sigma^{i,a} \in S$ é a configuração modificada

$$\sigma^{i,a}(j) = \sigma(j) \text{ para todo } j \neq i \; ; \quad \sigma^{i,a}(i) = a$$

e

$$c_i(a|\sigma) = \begin{cases} c_i(\sigma) & \text{se } a = -\sigma(i)\,, \\ M_i - c_i(\sigma) & \text{se } a = \sigma(i)\,. \end{cases} \tag{2.14}$$

De forma análoga, para todo número inteiro $\ell \geq 1$, definimos as taxas

$$c_i^{[\ell]}(a|\sigma) = \begin{cases} c_i^{[\ell]}(\sigma) & \text{se } a = -\sigma(i)\,, \\ M_i \sum_{k=0}^{\ell} \lambda_i(k) - c_i^{[\ell]}(\sigma) & \text{se } a = \sigma(i)\,. \end{cases} \tag{2.15}$$

e o gerador

$$\mathcal{G}^{[\ell]} f(\sigma) = \sum_{i \in \mathbb{Z}^d} \sum_{a \in A} c_i^{[\ell]}(a|\sigma)[f(\sigma^{i,a}) - f(\sigma)]\,. \tag{2.16}$$

Esta nova notação inclui nos geradores as taxas de saltos invisíveis nos quais o *spin* no sítio i é atualizado com o mesmo valor que tinha imediatamente antes do salto. Claramente, o gerador apresentado em (2.6) (e em (2.8), respectivamente) define a mesma dinâmica estocástica representada pelo gerador (2.13) (e por (2.16), respectivamente).

Com isso, temos o seguinte corolário do Teorema 2.3.1.

Corolário 2.3.2 *(Galves et al., 2010)*

$$\mathcal{G} f(\sigma) = \sum_{i \in \mathbb{Z}^d} \sum_{a \in A} \sum_{k \geq 0} M_i \lambda_i(k) p_i^{[k]}(a|\sigma(B_i(k)))[f(\sigma^{i,a}) - f(\sigma)] \tag{2.17}$$

e para todo $\ell \geq 1$,

$$\mathcal{G}^{[\ell]} f(\sigma) = \sum_{i \in \mathbb{Z}^d} \sum_{a \in A} \sum_{k=0}^{\ell} M_i \lambda_i(k) p_i^{[k]}(a|\sigma(B_i(k)))[f(\sigma^{i,a}) - f(\sigma)]\,, \tag{2.18}$$

onde, por conveniência, definimos $p_i^{[k]}(a|\sigma(B_i(k))) = p_i^{[0]}(a)$ *para* $k = 0$.

Demonstração. Segue imediatamente do Teorema 2.3.1 e da forma como os geradores infinitesimais são reescritos. •

Deste ponto em diante, fixaremos $\ell = L$. A decomposição apresentada no Corolário 2.3.2 sugere a seguinte construção das dinâmicas estocásticas de Ising que têm $\mathcal{G}$ e $\mathcal{G}^{[L]}$ como geradores infinitesimais.

Para cada $i \in \mathbb{Z}^d$, defina um processo pontual de Poisson N^i cujos intervalos entre ocorrências tem distribuição exponencial de taxa M_i. Todos os processos de Poisson associados a sítios diferentes são independentes. Se, no tempo t, o relógio de Poisson associado ao sítio i toca, escolhemos um alcance k com probabilidade $\lambda_i(k)$ independentemente de tudo que acontece no sistema. Então, atualizamos o valor da configuração neste sítio escolhendo um símbolo a com probabilidade $p_i^{[k]}(a|\sigma(B_i(k)))$ que depende apenas das configurações dentro do conjunto $B_i(k)$. No caso do processo com gerador $\mathcal{G}^{[L]}$, apenas alcances menores ou iguais a L podem ser escolhidos.

Este tipo de construção, portanto, sugere que é possível construir os dois processos de forma acoplada, utilizando os mesmos processos pontuais de Poisson e uma mesma família de variáveis aleatórias i.i.d. uniformes $(U_n(i), n \in \mathbb{N}, i \in \mathbb{Z}^d)$ para gerar os *spins* de acordo com as probabilidades de transição $p_i^{[k]}(\cdot|\sigma(B_i(k)))$. Isso será feito no Capítulo 4.

Capítulo 3

Simulação Perfeita

Este capítulo é dedicado à construção de algoritmos de simulação perfeita do modelo de Ising e de sua versão truncada. Na Seção 3.1, apresentamos um processo Markoviano de saltos que é a base da simulação, enquanto que na Seção 3.2 apresentamos o algoritmo de simulação perfeita de uma realização da projeção do modelo de Ising em conjuntos finitos de sítios de $\mathbb{Z}^d$.

A simulação perfeita (*Perfect Simulation* ou *Exact Sampling*, em Inglês) consiste em um conjunto de algoritmos que tem, como objetivo, simular uma realização de uma medida de probabilidade desconhecida ou, no caso desta Tese, que é função de uma configuração definida em um espaço infinito enumerável e, portanto, impossível de ser simulada de forma direta levando-se em conta o fato de que é impossível observarmos uma configuração de cardinalidade infinita.

Propp e Wilson (1996) foram os primeiros a apresentarem um algoritmo de simulação perfeita: o objetivo era obter uma amostra da probabilidade invariante de uma cadeia de Markov irredutível e com espaço de estados finito. Todavia, como veremos nesta seção, as mesmas ideias podem ser aproveitadas para amostrarmos uma realização de μ restrita a subconjuntos finitos de $\mathbb{Z}^d$.

3.1 Processo Reverso e perda de memória

Para cada sítio $i \in \mathbb{Z}^d$ e $t \geq 0$ fixados, definiremos o processo $(C_s^{(i,t)})_{s\geq 0}$ assumindo valores no conjunto de subconjuntos finitos de $\mathbb{Z}^d$ (que denotaremos por $\mathcal{F}(\mathbb{Z}^d)$) e de tal forma que $C_s^{(i,t)}$ será o conjunto de sítios no tempo $t-s$ cujos *spins* afetarão o *spin* do sítio i no tempo t. Este processo será a base para a construção do processo $(X_s)_s$.

Para cada $i \in \mathbb{Z}^d$, sejam $\ldots < T_{-2}^i < T_{-1}^i < T_0^i < 0 < T_1^i < T_2^i < \ldots$ os tempos de ocorrência do processo pontual de Poisson N^i de taxa M_i. Naturalmente, definimos o respectivo processo de contagem

$$N^i([s,u]) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} \mathbf{1}_{\{s\leq T_n^i \leq u\}}\,.$$

Os processos de Poisson associados a sítios diferentes são independentes. Para cada ponto T_n^i, associamos uma marca K_n^i, independente de T_n^i e escolhida com distribuição de probabilidade em $\{0,1,2,\ldots\}$ dada por $(\lambda_i(k))_{k\geq 0}$.

O processo pontual reverso associado ao sítio i e começando no tempo t é dado pela sequência de tempos

$$T_n^{(i,t)} = t - T_{N^i([0,t])-n+1},\ n \geq 1\,. \tag{3.1}$$

Definimos também o respectivo processo de contagem

$$N^{(i,t)}([s,u]) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} \mathbf{1}_{\{s\leq T_n^{(i,t)}\leq u\}}\,, \tag{3.2}$$

as marcas associadas a este processo,

$$K_n^{(i,t)} = K^i_{N^i([0,t])-n+1},\ n\geq 1 \tag{3.3}$$

e, para cada $k\geq 0$, o processo de Poisson k-marcado, começando no tempo t, é dado por

$$N^{(i,k,t)}([s,u]) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} \mathbf{1}_{\{s\leq T_n^{(i,t)}\leq u\}}\mathbf{1}_{\{K_n^{(i,t)}=k\}}\,. \tag{3.4}$$

Introduziremos uma família de transformações $\{\pi^{(i,k)}, i\in\mathbb{Z}^d, k\geq 0\}$ em $\mathcal{F}(\mathbb{Z}^d)$. Para quaisquer conjunto unitário $\{j\}\subset\mathcal{F}(\mathbb{Z}^d)$ e $k\geq 1$, definimos

$$\pi^{(i,k)}(\{j\}) = \begin{cases} B_i(k), & \text{se } j=i \\ \{j\}, & \text{caso contrário} \end{cases} \tag{3.5}$$

e, para $k=0$,

$$\pi^{(i,0)}(\{j\}) = \begin{cases} \emptyset, & \text{se } j=i \\ \{j\}, & \text{caso contrário.} \end{cases} \tag{3.6}$$

Finalmente, para todo conjunto $F\subset\mathcal{F}(\mathbb{Z}^d)$, definimos de forma análoga

$$\pi^{(i,k)}(F) = \bigcup_{j\in F}\pi^{(i,k)}(\{j\})\,. \tag{3.7}$$

O *processo reverso* (*backward sketch process*) começando no sítio i no tempo t será escrito como $(C_s^{(i,t)})_{s\geq 0}$. O conjunto $C_s^{(i,t)}$ é o conjunto de sítios no tempo $t-s$ cujos *spins* afetam o *spin* do sítio i no tempo t.

Definimos a evolução deste processo pela seguinte equação: $C_0^{(i,t)}=\{i\}$ e

$$f(C_s^{(i,t)}) = f(C_0^{(i,t)}) + \sum_{k\geq 0}\sum_{j\in\mathbb{Z}^d}\int_0^s [f(\pi^{(j,k)}(C_{u-}^{(i,t)})) - f(C_{u-}^{(i,t)})]N^{(j,k,t)}(du)\,, \tag{3.8}$$

onde $f:\mathcal{F}(\mathbb{Z}^d)\to\mathbb{R}$ é qualquer função cilíndrica limitada. Esta família de equações caracteriza de forma completa a evolução $(C_s^{(i,t)})_{s\geq 0}$. Para todo conjunto finito $F\subset\mathbb{Z}^d$, definimos

$$C_s^{(F,t)} = \bigcup_{i\in F} C_s^{(i,t)}\,. \tag{3.9}$$

De forma análoga, para o processo truncado $(X_s^{[L]})_s$, definimos seu processo reverso associado $(C_s^{[L],(i,t)})_{s\geq 0}$ da seguinte forma: $C_0^{[L],(i,t)}=\{i\}$ e

$$f(C_s^{[L],(i,t)}) = f(C_0^{[L],(i,t)}) + \sum_{k=0}^{L}\sum_{j\in\mathbb{Z}^d}\int_0^s [f(\pi^{(j,k)}(C_{u-}^{[L],(i,t)})) - f(C_{u-}^{[L],(i,t)})]N^{(j,k,t)}(du)\,, \tag{3.10}$$

onde usamos os mesmos processos pontuais de Poisson $N^{(j,k,t)}$, $0 \leq k \leq L$, como em (3.8). Definimos também, para $F \subset \mathbb{Z}^d$ finito,

$$C_s^{[L],(F,t)} = \bigcup_{i \in F} C_s^{[L],(i,t)} \,. \tag{3.11}$$

A definição do processo reverso é inspirada no artigo de Bertein e Galves (1977), que apresentam uma definição construtiva dos chamados *sistemas de partículas aditivos* (Harris, 1976), cuja propriedade principal é dada por (3.7), que nada mais é do que uma condição de *aditividade*.

As propriedades dos processos definidos acima são resumidos pela seguinte

Proposição 3.1.1 *(Galves et al., 2010) Para todo conjunto finito $F \subset \mathbb{Z}^d$ e todo $t \geq 0$ fixados, os processos $C_s^{(F,t)}$ e $C_s^{[L],(F,t)}$, $s \geq 0$, são processos Markovianos de salto em $\mathcal{F}(\mathbb{Z}^d)$ tendo como geradores infinitesimais,*

$$\mathcal{L}f(C) = \sum_{j \in C} \sum_{k \geq 1} M_j \lambda_j(k)[f(C \cup B_j(k)) - f(C)] + M_j \lambda_j(0)[f(C \backslash \{j\}) - f(C)] \,, \tag{3.12}$$

com condição inicial no tempo t, $C_0^{(F,t)} = F$, e

$$\mathcal{L}^{[L]}f(C) = \sum_{j \in C} \sum_{k=1}^{L} M_j \lambda_j(k)[f(C \cup B_j(k)) - f(C)] + M_j \lambda_j(0)[f(C \backslash \{j\}) - f(C)] \,, \tag{3.13}$$

com condição inicial no tempo t, $C_0^{[L],(F,t)} = F$, respectivamente. Aqui, $f : \mathcal{F}(\mathbb{Z}^d) \to \mathbb{R}$ é qualquer função cilíndrica limitada.

Demonstração. Segue imediatamente das definições (3.8) e (3.10). •

Agora, seja

$$T_{STOP}^{(F,t)} = \inf\{s \geq 0 : C_s^{(F,t)} = \emptyset\} \tag{3.14}$$

o tempo de relaxamento do processo reverso $(C_s^{(F,t)})_s$. A seguir, introduzimos a sequência de instantes de saltos $\tilde{T}_n^{(F,t)}$ dos processos $N^{(j,k)}$ cujos saltos ocorrem em (3.8). Seja $\tilde{T}_0^{(F,t)} = 0$ e, para $n \geq 1$, definimos os instantes sucessivos

$$\tilde{T}_n^{(F,t)} = \inf\{s > \tilde{T}_{n-1}^{(F,t)} : \exists j \in C_{\tilde{T}_{n-1}^{(F,t)}}^{(i,t)}, \exists k : N^{(j,k,t)}(]\tilde{T}_{n-1}^{(F,t)}, s]) = 1\} \,.$$

A sequência $(\tilde{T}_n^{(F,t)})_{n \geq 1}$ corresponde aos instantes de salto do processo $(C_s^{(F,t)})_s$. Agora, seja

$$\mathbf{C}_n^{(F,t)} = C_{\tilde{T}_n^{(F,t)}}^{(F,t)}$$

e, além disso, definimos

$$N_{STOP}^{(F,t)} = \inf\{n : \mathbf{C}_n^{(F,t)} = \emptyset\}$$

como sendo o número de saltos do processo reverso.

Com as definições acima, apresentamos o primeiro resultado ligado ao processo reverso e que será utilizado na próxima seção: o teorema que será enunciado a seguir garante que o processo

reverso, com probabilidade 1, não apenas termina em um número finito de passos, ou seja,

$$\mathbb{P}(N_{STOP}^{(F,t)} < +\infty) = 1\,,$$

mas também que o tempo de relaxamento é finito.

Esta última observação é importante porque garante que o procedimento de simulação perfeita (a ser apresentado na próxima seção) tenha uma propriedade de "perda de memória": sob algumas hipóteses, podemos construir a evolução $(X_s(F))_s$ de tal forma que $X_{t_1}(F)$ e $X_{t_2}(F)$ sejam construídos de forma independente se $|t_1 - t_2|$ for suficientemente grande.

Teorema 3.1.2 *Seja*

$$\gamma := 1 - \sup_{i\in\mathbb{Z}^d} \sum_{k=1}^{\infty} |B_i(k)|\lambda_i(k)$$

e suponha que

$$\sup_{i\in\mathbb{Z}^d} \sum_{k=1}^{\infty} |B_i(k)|\lambda_i(k) < 1\,. \tag{3.15}$$

Então, para todo $F \subset \mathbb{Z}^d$ finito e todo $s \geq 0$, vale que

$$\mathbb{E}(|C_s^{(F,t)}|) \leq |F|e^{-\gamma s}\,. \tag{3.16}$$

e, por consequência,

$$\mathbb{P}(T_{STOP}^{(F,t)} > s) \leq |F|e^{-\gamma s}\,. \tag{3.17}$$

Demonstração. Seja $N \in \mathbb{N}$ fixado. Definimos $L_s^i = |C_s^{(i,t)}|$ e

$$T_N = \inf\{u > 0 : L_u^i \geq N\}\,.$$

Por (3.8), temos que

$$\begin{aligned} L_{s\wedge T_N}^i \leq 1 &+ \sum_{k\geq 1}\sum_{j\in\mathbb{Z}^d} \int_0^{s\wedge T_N} (|B_j(k)| - 1)\mathbf{1}_{\{j\in C_{u-}^{(i,t)}\}} N^{(j,k,t)}(du) \\ &- \sum_{j\in\mathbb{Z}^d} \int_0^{s\wedge T_N} \mathbf{1}_{\{j\in C_{u-}^{(i,t)}\}} N^{(j,0,t)}(du)\,. \end{aligned} \tag{3.18}$$

Observe que, a partir da condição (3.15) e usando o fato de que $\inf_{j\in\mathbb{Z}^d} M_j > 1$, temos que

$$M_j\Big(\sum_{k\geq 1} \lambda_j(k)[|B_j(k)| - 1] - \lambda_j(0)\Big) \leq -(\inf_{j\in\mathbb{Z}^d} M_j)\gamma < 0\,.$$

Com isso, aplicando a esperança em ambos os lados de (3.18), temos que

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(L_{s\wedge T_N}^i) \leq 1 &+ \sum_{j\in\mathbb{Z}^d} M_j\Big(\sum_{k\geq 1} \lambda_j(k)[|B_j(k)| - 1] - \lambda_j(0)\Big) \\ &\times\ \mathbb{E}\Big(\int_0^{s\wedge T_N} \mathbf{1}_{\{j\in C_{u-}^{(i,t)}\}} du\Big) \leq 1 - \gamma\mathbb{E}\Big(\int_0^{s\wedge T_N} L_u^i du\Big)\,, \end{aligned} \tag{3.19}$$

uma vez que

$$\sum_{j\in\mathbb{Z}^d} \mathbf{1}_{\{j\in C_{u-}^{(i,t)}\}} = L_u^i \,.$$

Fazendo $N \to \infty$ e aplicando o Lema de Fatou, temos que

$$\mathbb{E}(L_s^i) \leq 1 - \gamma \int_0^s \mathbb{E}(L_u^i)du \,,$$

o que implica que $\mathbb{E}(L_s^i) \leq 1$ para todo $s \geq 0$. Com isso, podemos aplicar o Lema de Gronwall para chegarmos a

$$\mathbb{E}(L_s^i) \leq e^{-\gamma s} \tag{3.20}$$

e usando o fato de que $|C_s^{(F,t)}| \leq \sum_{i\in F} |C_s^{(i,t)}| = \sum_{i\in F} L_s^i$, temos que

$$\mathbb{E}(|C_s^{(F,t)}|) \leq |F|e^{-\gamma s} \,. \tag{3.21}$$

A segunda parte do teorema segue imediatamente de (3.16), uma vez que

$$\mathbb{P}(T_{STOP}^{(F,t)} > s) \leq \mathbb{P}(|C_s^{(F,t)}| \geq 1) \leq \mathbb{E}(|C_s^{(F,t)}|) \leq |F|e^{-\gamma s} \,.$$

Com isso, a demonstração está completa. •

3.2 Algoritmo de simulação perfeita

A decomposição apresentada no Corolário 2.3.2 sugere um procedimento de simulação para $(X_t(F), F \subset \mathbb{Z}^d)$, com t fixado e F finito, de forma que $X_t(F)$ tenha a mesma distribuição de μ restrita ao conjunto F. Tal procedimento será descrito a seguir.

Seja $\eta \in S$ a configuração inicial do processo. Na primeira etapa, construímos o processo reverso (*backward sketch process*) apresentado na seção anterior, com o objetivo de determinar o conjunto de sítios e a sucessão de escolhas que afetam a configuração dos sítios em F no instante t. O algoritmo começa com $C = F$ no instante $s = 0$. Então, a cada passo, esperamos a primeira ocorrência do processo de Poisson reverso de taxa $\sum_{j\in C} M_j$ antes do tempo t. Neste momento, escolhemos um sítio $j \in C$ com probabilidade

$$\frac{M_j}{\sum_{\ell\in C} M_\ell}$$

e um alcance k com probabilidade $\lambda_j(k)$. Se $k = 0$, então atribuímos um *spin* para j com lei $p_i^{[0]}$, independentemente dos outros sítios, e o excluímos do conjunto C. Caso contrário, incluímos $B_i(k)$ ao conjunto C e recomeçamos o procedimento. O algoritmo para quando o tempo acumulado do processo reverso ultrapassa t ou quando $C = \emptyset$ (ou seja, não é mais necessário olhar de volta no tempo para atribuir *spins* aos sítios já visitados). O procedimento está descrito formalmente pelo Algoritmo 1.

Então, em um segundo passo, realizamos um procedimento de atribuição de *spins* (*forward spin assingnment procedure*) para todos os sítios envolvidos no Algoritmo 1. Este procedimento está descrito formalmente pelo Algoritmo 2. Primeiramente, todos os sítios que não escolheram um alcance $k = 0$ ao final primeira etapa receberão a configuração η no instante $s = 0$. E então, sucessivamente,

avançando no tempo, definimos os *spins* para os outros sítios de acordo com $p_j^{[k]}(\cdot|B_j(k))$, onde os *spins* dos sítios de $B_j(k)$ já foram atribuídos em algum passo anterior do algoritmo.

Os Algoritmos 1 e 2 utilizam as seguintes variáveis:

- N é uma variável auxiliar que assume valores no conjunto $\{0, 1, 2, \ldots\}$
- N_{STOP} é um contador que assume valores no conjunto $\{0, 1, 2, \ldots\}$
- T_{STOP} é um número real positivo
- I é uma variável que assume valores em $\mathbb{Z}^d$
- K é uma variável que assume valores em $\{0, 1, 2, \ldots\}$
- T é um número real positivo
- $D = (D_1, D_2)$, onde
  - D_1 é um vetor (*array*) de elementos de $\mathbb{Z}^d$
  - D_2 é um vetor de elementos de $\{0, 1, 2, \ldots\}$
- C é uma variável que assume valores em $\mathcal{F}(\mathbb{Z}^d)$
- W é uma variável auxiliar que assume valores em $A = \{-1, 1\}$
- V é um vetor de elementos de A
- ξ é uma função de $\mathbb{Z}^d$ em $A \cup \Delta$, onde Δ é um símbolo adicional que não pertence ao conjunto A.

Algoritmo 1 Processo Reverso (*Backward Sketch Process*)

Entrada: F; *Saída:* N_{STOP}, D
$N \leftarrow 0$, $N_{STOP} \leftarrow 0$, $C \leftarrow F$, $D \leftarrow \emptyset$
Enquanto $C \neq \emptyset$ **Faça**
    $N \leftarrow N + 1$
    Escolha um sítio $I \in C$ e $K \in \{0, 1, 2, \ldots\}$ aleatoriamente com probabilidade

$$\mathbb{P}(I = i', K = k) = \frac{M_{i'}\lambda_{i'}(k)}{\sum_{j \in C} M_j}.$$

    Se $K = 0$ **Então**
        $C \leftarrow C \setminus \{I\}$
    Senão
        $C \leftarrow C \cup B_I(K)$
    Fim Se
    $D(N) \leftarrow (I, K)$
Fim Enquanto
$N_{STOP} \leftarrow N$
Devolva N_{STOP}, D.

Para que o Algoritmo 1 seja bem sucedido, ele deve, com probabilidade 1, parar após um número finito de passos. Isso é garantido pelo seguinte

Algoritmo 2 Procedimento de atribuição de *spins* (*Forward Spin Assignment Procedure*)

1: *Entrada:* N_{STOP}, D; *Saída:* $\{(i, \xi(i)), i \in F\}$
2: $N \leftarrow N_{STOP}$
3: $\xi(j) \leftarrow \Delta$ para todo $j \in \mathbb{Z}^d$
4: **Enquanto** $N \geq 1$ **Faça**
5: $(I, K) \leftarrow D(N)$
6: **Se** $K = 0$ **Então**
7: Escolha W aleatoriamente em A de acordo com a distribuição

$$\mathbb{P}(W = w) = p_I^{[0]}(w)\,.$$

8: **Senão**
9: Escolha W aleatoriamente em A de acordo com a distribuição

$$\mathbb{P}(W = w) = p_I^{[K]}(w|\xi(B_I(K)))\,.$$

10: **Fim Se**
11: $\xi(I) \leftarrow W$
12: $V(N) \leftarrow W$
13: $N \leftarrow N - 1$
14: **Fim Enquanto**
15: **Devolva** $\{(i, \xi(i)), i \in F\}$

Teorema 3.2.1 *Sob as condições do Teorema 3.1.2,*

1. *Os Algoritmos 1 e 2 são bem-sucedidos.*

2. *A medida μ é a única probabilidade invariante do processo $(X_s)_s$. Além disso, a lei do conjunto $\{(i, \xi(i)), i \in F\}$ obtido ao final dos Algoritmos 1 e 2 é a projeção de μ em A^F.*

Demonstração. O item 1 é consequência direta do Teorema 3.1.2, uma vez que N_{STOP}, o número de passos do Algoritmo 1, é equivalente a $N_{STOP}^{(F,t)}$ na definição do processo reverso. Portanto, resta demonstrar o item 2.

Seja μ_F a lei da saída $\{(i, \xi(i)), i \in F\}$ dos Algoritmos 1 e 2; μ_F é uma medida de probabilidade em A^F. Por construção, a família de probabilidades $\{\mu_F, F \subset \mathbb{Z}^d \text{ finito}\}$ é uma família consistente de distribuições de dimensão finita. Portanto, existe uma única medida de probabilidade ν em $(S, \mathcal{S})$ tal que ν_F é a projeção de ν em A^F, para todo conjunto finito de sítios $F \subset \mathbb{Z}^d$.

Por construção, o modelo de Ising μ é reversível com respeito ao processo $(X_s)_s$ e, portanto, é um candidato a ser a probabilidade invariante do processo. Vamos mostrar que $\nu = \mu$. Para isso, faremos uma modificação nos Algoritmos 1 e 2 para construir X_t^η para alguma configuração inicial $\eta \in S$. Substitua os passos 1–3 do Algoritmo 1 por

1. *Entrada:* F, t; *Saída:* N_{STOP}, C, D, T_{STOP}

2. $N \leftarrow 0$, $N_{STOP} \leftarrow 0$, $C \leftarrow F$, $T_{STOP} \leftarrow 0$

3. **Enquanto** $T_{STOP} < t$ e $C \neq \emptyset$

3'. Escolha um tempo aleatório $T > 0$ de acordo com uma distribuição exponencial de taxa $\sum_{j \in C} M_j$. Atualize

$$T_{STOP} \leftarrow T_{STOP} + T\,.$$

Aqui, $D = (D_1, D_2, D_3)$, onde:

- D_1 é um vetor de elementos de $\mathbb{Z}^d$
- D_2 é um vetor de elementos de $\{0, 1, 2, \ldots\}$
- D_3 é um vetor de números reais positivos.

Finalmente, substitua o passo 14 do Algoritmo 1 por

14. **Devolva** N_{STOP}, C, D.

Nesta versão modificada, paramos o algoritmo após o tempo t se o conjunto C obtido ao final do procedimento não for vazio. A saída C, neste caso, corresponde exatamente ao conjunto $C_t^{(F,t)}$ de sítios no tempo 0 cujos *spins* influenciam os *spins* dos sítios em F no tempo t. Finalmente, observe que se $C = \emptyset$, então $T_{STOP} < t$ e, neste caso, $T_{STOP} = T_{STOP}^{(F,t)}$ é o tempo de relaxamento do processo reverso.

Para o Algoritmo 2, substitua o passo 1 por

1. *Entrada:* N_{STOP}, C, D; *Saída:* $\{(i, \xi(i)), i \in F\}$

e o passo 3 por

3. $\xi(j) \leftarrow \eta(j)$ para todo $j \in C$; $\xi(j) \leftarrow \Delta$ para todo $j \in \mathbb{Z}^d \setminus C$.

Então, a lei do conjunto $\{(i, \xi(i)), i \in F\}$ obtido ao final do Algoritmo 2 modificado é a lei de $X_t^\eta(F)$. Observe que a saída do Algoritmo 2 modificado é igual à saída do Algoritmo 2 original se $T_{STOP} < t$. Seja $f : A^F \to \mathbb{R}_+$ uma função mensurável e limitada. Então,

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[f(X_t^\eta(i), i \in F)] &= \mathbb{E}[f(X_t^\eta(i), i \in F); T_{STOP} < t] + \mathbb{E}[f(X_t^\eta(i), i \in F); T_{STOP} \geq t] \\ &= \mathbb{E}[f(\xi(i), i \in F); T_{STOP} < t] + \mathbb{E}[f(X_t^\eta(i), i \in F); T_{STOP} \geq t]\,, \qquad (3.22)\end{aligned}$$

onde $(\xi(i), i \in F)$ é a saída dos Algoritmos 1 e 2 originais. Sob as hipóteses do Teorema 3.1.2, temos que

$$\mathbb{E}[f(X_t^\eta(i), i \in F); T_{STOP} \geq t] \leq ||f||_\infty \mathbb{P}(T_{STOP} \geq t) \to 0 \text{ quando } t \to \infty\,,$$

o que implica que

$$\lim_{t\to\infty} \mathbb{E}[f(X_t^\eta(i), i \in F)] = \mathbb{E}[(f(\xi(i), i \in F)]\,,$$

uma vez que $\mathbf{1}_{\{T_{STOP}<t\}} \to 1$ quase-certamente.

Isto implica que ν é uma probabilidade invariante do processo. Ao substituir a condição inicial η por qualquer condição estacionária inicial, temos a unicidade da probabilidade invariante. Com isso, demonstramos que μ é a única probabilidade invariante do processo $(X_s)_s$. •

Observe que o Teorema 3.2.1 não apenas mostra que o processo $(X_s)_s$ tem o modelo de Ising μ como sua única probabilidade invariante, mas também indica um procedimento de *simulação perfeita* da medida μ projetada em cilindros finitos $F \subset \mathbb{Z}^d$ como descrito, por exemplo, em Galves et al. (2010).

Observe que o Teorema 3.1.2 e o Teorema 3.2.1 são válidos também para o processo $(X_s^{[L]})_s$ e o modelo de Ising truncado $\mu^{[L]}$, sua única probabilidade invariante. Para isso, usam-se os mesmos

argumentos das demonstrações de ambos, com a diferença de que utilizamos (3.10) na demonstração da Teorema 3.1.2 e o passo 5 do Algoritmo 1 original é substituído pelo passo

5. Escolha um sítio $I \in C$ e $K \in \{0, 1, \ldots, L\}$ aleatoriamente com probabilidade

$$\mathbb{P}(I = i', K = k) = \frac{M_{i'}\lambda_{i'}(k)}{\sum_{j\in C}\sum_{\ell=0}^{L} M_j\lambda_j(\ell)}\,.$$

Observe que se $D_2(n) \leq L$ para todo $1 \leq n \leq N_{STOP}$, nenhum alcance maior que L foi selecionado no Algoritmo 1. Isso implica que a saída $((i, \xi(i)), i \in F)$ obtida ao final do Algorimo 2 também é uma amostra de $\mu_F^{[L]}$, a projeção do modelo de Ising $\mu^{[L]}$ no conjunto F. Esta observação sugere uma modificação do Algoritmo 1 com o objetivo de construir um acoplamento $((X(i), X^{[L]}), i \in F)$ tal que $X(F) \in A^F$ tem lei μ_F e $X^{[L]}(i) \in A^F$ tem lei $\mu_F^{[L]}$. Esta modificação, que será chamada de Algoritmo 3, constrói simultaneamente os processos reversos $(\mathbf{C}_n^{(F,t)})_n$ e $(\mathbf{C}_n^{[L],(F,t)})_n$ utilizando os mesmos processos pontuais de Poisson dados em (3.8) e (3.10).

Para este novo algoritmo, definimos as seguintes variáveis adicionais:

- $N_{STOP}^{[L]}$ é um contador que assume valores no conjunto $\{0, 1, 2, \ldots\}$
- $I^{[L]}$ é uma variável que assume valores em $\mathbb{Z}^d$
- $K^{[L]}$ é uma variável que assume valores em $\{0, 1, 2, \ldots\}$
- $D^{[L]} = (D_1^{[L]}, D_2^{[L]})$, onde
  - $D_1^{[L]}$ é um vetor (*array*) de elementos de $\mathbb{Z}^d$
  - $D_2^{[L]}$ é um vetor de elementos de $\{0, 1, 2, \ldots\}$
- $C^{[L]}$ é uma variável que assume valores em $\mathcal{F}(\mathbb{Z}^d)$
- $\xi^{[L]}$ é uma função de $\mathbb{Z}^d$ em $A \cup \Delta$, onde Δ é um símbolo adicional que não pertence ao conjunto A.

Observe que o Algoritmo 3 é equivalente ao Algoritmo 1 quando ignoramos os passos de 12 a 25 e as variáveis com sobrescrito L. Se $D = D^{[L]}$, então usamos o Algoritmo 2 para amostrarmos $X(F) = X^{[L]}(F)$. Caso contrário, usamos o Algoritmo 2 duas vezes, de forma independente uma da outra, usando a entrada N_{STOP}, D para amostrar $X(F)$ e usando a entrada $N_{STOP}^{[L]}$, $D^{[L]}$ para amostrar $X^{[L]}(F)$.

Antes de apresentarmos o resultado ligado a este acoplamento, vamos definir os seguintes tempos de parada com respeito ao processo reverso $(C_s^{(i,t)})_s$: para todo sítio $j \in \mathbb{Z}^d$ e $u > 0$, seja

$$T_1^{(j,t),u} = \inf\{T_n^{(j,t)} > u\} - u$$

o primeiro salto do processo de Poisson $(\tilde{T}_n^{(j,t)})_n$ a partir do instante u. Finalmente, seja $\mathcal{T}_L^{(i,t)}$ o primeiro instante em que um alcance maior que L é selecionado no processo $(C_s^{(i,t)})_s$, ou seja,

$$\mathcal{T}_L^{(i,t)} = \inf\Big\{u > 0 : \sum_{j\in C_u^{(i,t)}}\sum_{k>L} N^{(j,k,t)}([u, u + T_1^{(j,t),u}[) \geq 1\Big\}. \tag{3.23}$$

Com isso, podemos apresentar o resultado.

Algoritmo 3 Processo Reverso (*Backward Sketch Process*) para o acoplamento dos modelos de Ising

Entrada: F; *Saída:* N_{STOP}, $N_{STOP}^{[L]}$, D, $D^{[L]}$
$N \leftarrow 0$, $N_{STOP} \leftarrow 0$, $C \leftarrow F$, $C^{[L]} \leftarrow F$, $D \leftarrow \emptyset$, $D^{[L]} \leftarrow \emptyset$
Enquanto $C \neq \emptyset$ **Faça**
    $N \leftarrow N + 1$
    Escolha um sítio $I \in C$ e $K \in \{0, 1, 2, \ldots\}$ aleatoriamente com probabilidade

$$\mathbb{P}(I = i', K = k) = \frac{M_{i'}\lambda_{i'}(k)}{\sum_{j \in C} M_j}.$$

    Se $K = 0$ **Então**
        $C \leftarrow C \setminus \{I\}$
    Senão
        $C \leftarrow C \cup B_I(K)$
    Fim Se
    $D(N) \leftarrow (I, K)$
    Se $C^{[L]} \neq \emptyset$ **Então**
        $N_{STOP}^{[L]} \leftarrow N_{STOP}^{[L]} + 1$
        Se $I \in C^{[L]}$ e $K \in \{0, 1, \ldots, L\}$ **Então**
            $I^{[L]} \leftarrow I$, $K^{[L]} \leftarrow K$
        Senão
            Escolha um sítio $I^{[L]} \in C^{[L]}$ e $K^{[L]} \in \{0, 1, \ldots L\}$ aleatoriamente com probabilidade

$$\mathbb{P}(I^{[L]} = i, K^{[L]} = k) = \frac{M_i\lambda_i(k)}{\sum_{j \in C^{[L]}} \sum_{\ell=0}^{L} M_j\lambda_j(\ell)}$$

            .
            Se $K^{[L]} = 0$ **Então**
                $C^{[L]} \leftarrow C^{[L]} \setminus \{I^{[L]}\}$
            Senão
                $C^{[L]} \leftarrow C^{[L]} \cup B_{I^{[L]}}(K^{[L]})$
            Fim Se
            $D^{[L]}(N) \leftarrow (I^{[L]}, K^{[L]})$
        Fim Se
    Fim Se
Fim Enquanto
$N_{STOP} \leftarrow N$
Devolva N_{STOP}, $N_{STOP}^{[L]}$, D, $D^{[L]}$

Teorema 3.2.2 *(Galves et al., 2010) Suponha que as condições do Teorema 3.1.2 estão satisfeitas. Então, uniformemente em $F \subset \mathbb{Z}^d$ finito e $t \geq 0$, temos que*

1.
$$\mathbb{P}(N_{STOP}^{(F,t)} > n) \leq |F|(1-\gamma)^n\,, \tag{3.24}$$
onde $N_{STOP}^{(F,t)}$ é o numero de passos do processo reverso $(C_s^{(F,t)})_s$.

2.
$$\mathbb{P}(X(F) \neq X^{[L]}(F)) \leq |F| \sup_{i\in\mathbb{Z}^d} \mathbb{P}(\mathcal{T}_L^{(i,t)} \leq T_{STOP}^{(i,t)}) \leq \frac{|F|}{\gamma}\delta(L)\,, \tag{3.25}$$
onde
$$\delta(L) := \sup_{j\in\mathbb{Z}^d}(1 - e^{-\beta\sum_{l\notin B_j(L)}|J(j,l)|})\,. \tag{3.26}$$

Demonstração. Começaremos pela demonstração do item 1. Seja

$$L_n^{(i,t)} = |\mathbf{C}_n^{(i,t)}|$$

a cardinalidade do conjunto $\mathbf{C}_n^{(i,t)}$ após n passos do Algoritmo 1. Pelas hipóteses, $L_n^{(i,t)}$ pode ser comparado com um processo de ramificação $W_n^{(i)}$ cujo número médio de descendentes é limitado por $1-\gamma$ em cada passo e de tal forma que $L_n^{(i,t)} \leq W_n^{(i)}$.

Os detalhes são dados em Galves et al. (2010), prova do Teorema 1, e não serão exibidos aqui. Portanto,

$$\mathbb{P}(N_{STOP}^{(i,t)} > n) = \mathbb{P}(L_n^{(i,t)} \geq 1) \leq \mathbb{P}(W_n^{(i)} \geq 1) \leq \mathbb{E}(W_n^{(i)}) = (1-\gamma)^n\,.$$

Em particular, quando começamos o processo reverso com a condição inicial F em vez do conjunto unitário $\{i\}$, a estimativa continua válida ao multiplicar o limite superior por $|F|$ devido às propriedades de independência do processo de ramificação.

Para a demonstração do item 2, lembramos que para construir μ e $\mu^{[L]}$, usamos os mesmos processos pontuais de Poisson para todos os alcances $k \leq L$. Portanto, temos que

$$\mathbb{P}(X(i) \neq X^{[L]}(i)) \leq \mathbb{P}(\mathcal{T}_L^{(i,t)} \leq T_{STOP}^{(i,t)})\,.$$

Agora, seja $\alpha_i(k) := \sum_{\ell\leq k}\lambda_i(\ell)$. Pela estrutura da interação, para $k \geq 2$, $\alpha_i(k) = e^{-\beta\sum_{j\notin B_i(k)}|J(i,j)|}$ e, portanto, $1-\alpha_i(L) \leq \delta(L)$. Com isso, temos que

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}(\mathcal{T}_L^{(i,t)} \leq T_{STOP}^{(i,t)}) &\leq \sum_{n\geq 1}\mathbb{E}(\mathbb{P}(\{N^{(j,k,t)}(]\tilde{T}_{n-1}^{(i,t)}, \tilde{T}_n^{(i,t)}]) = 1 \\
&\quad \text{para } j \in \mathbf{C}_{n-1}^{(i,t)},\ k > L\}|\mathbf{C}_{n-1}^{(i,t)},\ N_{STOP}^{(i,t)} > n-1)) \\
&= \sum_{n\geq 1}\mathbb{E}\Big(\sum_{j\in\mathbf{C}_{n-1}^{(i,t)}} \frac{M_j(1-\alpha_j(L))}{\sum_{k\in\mathbf{C}_{n-1}^{(i,t)}} M_k}\mathbf{1}_{\{N_{STOP}^{(i,t)}>n-1\}}\Big) \\
&\leq \sum_{n\geq 1}\mathbb{E}\Big(\sum_{j\in\mathbf{C}_{n-1}^{(i,t)}} \frac{M_j\delta(L)}{\sum_{k\in\mathbf{C}_{n-1}^{(i,t)}} M_k}\mathbf{1}_{\{N_{STOP}^{(i,t)}>n-1\}}\Big) \\
&= \delta(L)\mathbb{E}(N_{STOP}^{(i,t)})\,.
\end{aligned}$$

No cálculo acima, usamos o fato de que, dado o conjunto $\mathbf{C}_{n-1}^{(i,t)}$, $\tilde{T}_n^{(i,t)}$ é um salto de $N^{(j,k,t)}$ com probabilidade

$$\frac{M_j \lambda_j(k)}{\sum_{k \in \mathbf{C}_{n-1}^{(i,t)}} M_k}\,.$$

Somando sobre todas as possibilidades $k > L$, temos o termo

$$\frac{M_j(1-\alpha_j(L))}{\sum_{k \in \mathbf{C}_{n-1}^{(i,t)}} M_k}\,.$$

Aplicando o item 1 do teorema, temos que $\mathbb{E}(N_{STOP}^{(i,t)}) \leq 1/\gamma$; logo,

$$\mathbb{P}(X(i) \neq X^{[L]}(i)) \leq \frac{1}{\gamma}\delta(L)\,.$$

Finalmente, uma vez que

$$\mathbb{P}(X(F) \neq X^{[L]}(F)) = \mathbb{P}(\{\exists i \in F : X(i) \neq X^{[L]}(i)\}) \leq \sum_{i \in F} \mathbb{P}(X(i) \neq X^{[L]}(i)) \leq \frac{|F|}{\gamma}\delta(L)\,,$$

chegamos ao resultado desejado, concluindo a demonstração. •

3.3 A distância $\bar{d}$

Dadas duas medidas de probabilidades μ e ν em um conjunto S, um acoplamento entre μ e ν é uma medida de probabilidade em $S \times S$ que tem μ e ν como suas respectivas distribuições marginais. Denotaremos por $\mathcal{M}(\mu, \nu)$ o conjunto de todos os acoplamentos entre μ e ν.

A distância $\bar{d}$ entre duas medidas de probabilidade μ_1 e μ_2 em $S = A^{\mathbb{Z}^d}$ é definida da seguinte forma:

$$\bar{d}(\mu_1, \mu_2) := \inf_{Q \in \mathcal{M}(\mu_1, \mu_2)} \Big(\sup_{i \in \mathbb{Z}^d} Q(X_1(i) \neq X_2(i)) \Big)\,, \tag{3.27}$$

onde X_ℓ é uma variável aleatória com lei μ_ℓ para $\ell = 1, 2$.

Do ponto de vista de acoplamentos, a distância $\bar{d}$ indica o valor mínimo que a probabilidade de discrepância entre duas realizações acopladas de μ_1 e μ_2, restrita a um único sítio, pode assumir.

Como uma aplicação do algoritmo de simulação perfeita do acoplamento das medidas μ e $\mu^{[L]}$, apresentamos o seguinte

Teorema 3.3.1 *(Galves et al., 2010) Sob as hipóteses do Teorema 3.2.2, temos que*

$$\bar{d}(\mu, \mu^{[L]}) \leq \frac{1}{\gamma} \sup_{i \in \mathbb{Z}^d} (1 - e^{-\beta \sum_{j \notin B_i(L)} |J(i,j)|})\,. \tag{3.28}$$

Demonstração. O resultado é consequência imediata do item 2 do Teorema 3.2.2, uma vez que o limite superior em (3.25) também é um limite superior para (3.27). •

Capítulo 4

Acoplamento e consequências da simulação perfeita

Na primeira seção deste capítulo, definimos um acoplamento das dinâmicas estocásticas $(X_s)_s$ e $(X_s^{[L]})$ que será a base para a demonstração do Teorema 5.2.1. Além disso, na Seção 4.2, discutiremos sobre a existência de um acoplamento entre a probabilidade de alcance infinito e sua versão cujas interações estão restritas a um conjunto finito de $\mathbb{Z}^d$: este é o conteúdo do Teorema 4.2.1, o primeiro resultado original desta Tese.

4.1 Acoplamento das dinâmicas estocásticas

No capítulo anterior, apresentamos um algoritmo para simularmos o processo (X_s) em um tempo fixado. Nesta seção, construiremos uma realização estacionária do processo $(X_s)_s$ em um intervalo de tempo finito, por exemplo, $[0, t]$. Para tanto, seja $F \subset \mathbb{Z}^d$ finito. Usaremos uma versão modificada do Algoritmo 1: começando o processo reverso no instante $s = t$, um sítio não desaparece do conjunto C quando $K = 0$. Isso faz com que C nunca seja vazio no instante $s = 0$. Chamaremos esta nova versão de Algoritmo 4.

A seguir, com a saída do Algoritmo 4, aplicamos o procedimento de atribuição de *spins* com configuração inicial $\eta \in S$. Este procedimento será denominado Algoritmo 5.

Com as saídas D do Algoritmo 4 e V do Algoritmo 5, construímos a evolução $(X_s(F), 0 \leq s \leq t)$ da seguinte maneira.

1. Defina $X_0(F) = \eta(F)$.

2. Se $V = \emptyset$, então $X_s(F) = \eta(F)$ para todo $s \in [0, t]$.

3. Se $V \neq \emptyset$, então definimos os seguintes tempos aleatórios: para todo $1 \leq n \leq N_{STOP}$,

$$S_n = T_{STOP} - D_3(N_{STOP} - n + 1)\,,$$

   e $S_{N_{STOP}+1} = t$.

   - Definimos $X_s(F) = \eta(F)$ para todo $s \in [0, S_1[$.
   - Para $1 \leq n \leq N_{STOP}$, para $S_n \leq s < S_{n+1}$,

Algoritmo 4 Processo Reverso (*Backward Sketch Process*) sem mortes

Entrada: F, t ; *Saída:* N_{STOP}, C, D, T_{STOP}
$N \leftarrow 0$, $N_{STOP} \leftarrow 0$, $C \leftarrow F$, $T_{STOP} \leftarrow 0$
Enquanto $T_{STOP} < t$ **Faça**
Escolha um tempo aleatório $T > 0$ de acordo com uma distribuição exponencial de parâmetro $\sum_{j \in C} M_j$. Atualize

$$T_{STOP} \leftarrow T_{STOP} + T\,.$$

$N \leftarrow N + 1$
Escolha um sítio $I \in C$ e $K \in \{0, 1, 2, \ldots\}$ aleatoriamente com probabilidade

$$\mathbb{P}(I = i', K = k) = \frac{M_{i'}\lambda_{i'}(k)}{\sum_{j \in C} M_j}\,.$$

$C \leftarrow C \cup B_I(K)$
$D(N) \leftarrow (I, K, T_{STOP})$
Fim Enquanto
$N_{STOP} \leftarrow N$
Devolva N_{STOP}, C, D, T_{STOP}.

- para todo $i \in F$ tal que $i \neq D_1(N_{STOP} - n + 1)$, $X_s(i) = X_{S_n}(i)$
- para $i = D_1(N_{STOP} - n + 1)$, $X_s(i) = V(n)$.

Para que o procedimento seja bem sucedido, o conjunto C obtido ao final do Algoritmo 4 deve ser finito com probabilidade 1. Isso é garantido pela seguinte

Proposição 4.1.1 *Se*

$$\sup_{i \in \mathbb{Z}^d} \sum_{k \geq 1} |B_i(k)| \lambda_i(k) < \infty\,, \tag{4.1}$$

então o Algoritmo 4 para, quase certamente, após um número finito de passos, ou seja,

$$\mathbb{P}(N_{STOP} < \infty) = 1\,.$$

Demonstração. Seja $(\tilde{C}_s^{(i,t)})_{s \geq 0}$ o processo reverso associado ao Algoritmo 4 com condição inicial dada pelo conjunto unitário $\{i\}$ e $\tilde{L}_s^i = |\tilde{C}_s^{(i,t)}|$. Defina, para $N \in \mathbb{N}$ fixado,

$$T_N = \inf\{s : \tilde{L}_s^i \geq N\}\,.$$

De forma análoga à demonstração do Teorema 3.1.2, temos que

$$\mathbb{E}(\tilde{L}_{s \wedge T_N}^i) \leq 1 + m \int_0^{s \wedge T_N} \tilde{L}_u^i du\,,$$

onde

$$m := \sup_{i \in \mathbb{Z}^d} \sum_{k \geq 0} M_i \lambda_i(k) |B_i(k)| < \infty\,.$$

Algoritmo 5 Procedimento de atribuição de *spins* (*Forward Spin Assignment Procedure*)

1: *Entrada:* N_{STOP}, C, D; *Saída:* V
2: $N \leftarrow N_{STOP}$
3: $\xi(j) \leftarrow \eta(j)$ para todo $j \in C$, $\xi(j) \leftarrow \Delta$ para todo $j \in \mathbb{Z}^d \backslash C$, $V \leftarrow \emptyset$
4: **Enquanto** $N \geq 1$ **Faça**
5: $(I, K, T) \leftarrow D(N)$
6: **Se** $K = 0$ **Então**
7: Escolha W aleatoriamente em A de acordo com a distribuição

$$\mathbb{P}(W = w) = p_I^{[0]}(w)\,.$$

8: **Senão**
9: Escolha W aleatoriamente em A de acordo com a distribuição

$$\mathbb{P}(W = w) = p_I^{[K]}(w|\xi(B_I(K)))\,.$$

10: **Fim Se**
11: $\xi(I) \leftarrow W$
12: $V(N) \leftarrow W$
13: $N \leftarrow N - 1$
14: **Fim Enquanto**
15: **Devolva** V

Fazendo $N \to \infty$, temos que

$$\mathbb{E}(\tilde{L}_s^i) \leq 1 + m \int_0^s \tilde{L}_u^i du\,,$$

e, pelo Lema de Gronwall, finalmente chegamos a

$$\mathbb{E}(\tilde{L}_s^i) \leq e^{ms}\,.$$

Isso implica que o número de sítios que temos que determinar para saber o valor do *spin* do sítio i no instante t é finito com probabilidade 1, o que significa que $\tilde{C}_s^{(F,t)}$ admite um número finito de saltos em qualquer intervalo de tempo finito. Portanto, $N_{STOP} < \infty$ com probabilidade 1. Isso completa a demonstração. •

Observe que a condição (4.1) é mais fraca que a condição (3.15), o que implica que podemos aplicar a Proposição 4.1.1 em nosso contexto. Além disso, o mesmo argumento pode ser utilizado para construir o processo $(X_s(F))_s$ em qualquer intervalo finito de tempo $[s_1, s_2]$, onde $s_1 < s_2$. Isso é importante porque a construção de $(X_s(F))_s$ pode ser feita dividindo o intervalo $[0, t]$ em subintervalos menores quando t é grande. Finalmente, para que a evolução seja estacionária, basta escolher $\eta(C)$ com probabilidade μ_C a partir dos Algoritmos 1 e 2, apresentados anteriormente no Capítulo 3.

Para simularmos a evolução $(X_s^{[L]}(F), 0 \leq s \leq t)$ com configuração inicial η, aplicamos o Algoritmo 4 substituindo o passo 6 pelo passo

6. Escolha um sítio $I \in C$ e $K \in \{0, 1, \ldots L\}$ aleatoriamente com probabilidade

$$\mathbb{P}(I = i', K = k) = \frac{M_{i'}\lambda_{i'}(k)}{\sum_{j \in C}\sum_{k=0}^{L} M_j \lambda_j(k)}\,.$$

Sejam $i \in \mathbb{Z}^d$ e $t > 0$ fixados. Sejam $(\tilde{X}_s(i))_{s\geq 0}$ e $(\tilde{X}_s^{[L]}(i))_{s\geq 0}$ as projeções no sítio i dos processos de Markov com geradores infinitesimais

$$\mathcal{G}f(\sigma) = \sum_{i\in\mathbb{Z}^d}\sum_{a\in A}\sum_{k\geq 0} M_i\lambda_i(k)p_i^{[k]}(a|\sigma)[f(\sigma^{i,a}) - f(\sigma)] \tag{4.2}$$

e

$$\mathcal{G}^{[L]}f(\sigma) = \sum_{i\in\mathbb{Z}^d}\sum_{a\in A}\sum_{k=0}^{L} M_i\lambda_i(k)p_i^{[k]}(a|\sigma)[f(\sigma^{i,a}) - f(\sigma)]\,, \tag{4.3}$$

respectivamente, e construídos com os mesmos processos de Poisson $N^{(j,k,t)}$. Construiremos estes processos de tal forma que sejam estacionários e que o par $(\tilde{X}_0(i), \tilde{X}_0^{[L]}(i))$ seja construído a partir do algoritmo de simulação perfeita apresentado no Capítulo 3. Esta construção será feita da seguinte forma:

1. Primeiramente, construímos o processo reverso para a evolução $(\tilde{X}_s(i))_{0\leq s\leq t}$.
2. Se $D_2(n) \leq L$ para todo $1 \leq n \leq N_{STOP}$:
   - Aplicamos o Algoritmo 3 com conjunto inicial C, onde $C \subset \mathbb{Z}^d$ é a saída do Algoritmo 4, para obtermos um acoplamento de μ_C e $\mu_C^{[L]}$ e definimos os valores de $\tilde{X}_s(i)$ e $\tilde{X}_s^{[L]}(i)$ para $s = 0$ a partir deste acoplamento.
   - Utilizamos a saída V do Algoritmo 5 para definir os valores do processo $(\tilde{X}_s^{[L]}(i))_{0\leq s\leq t}$ nos instantes de salto, que são os mesmos do processo $(\tilde{X}_s(i))_{0\leq s\leq t}$.
3. Se $D_2(n) > L$ para algum n:
   - Aplicamos o Algoritmo 4 para a evolução $(\tilde{X}_s^{[L]}(i))_{0\leq s\leq t}$ utilizando os mesmos processos de Poisson $N^{(j,k,t)}$.
   - Seja $C^{[L]} \subset \mathbb{Z}^d$ a saída do Algoritmo 4 para esta evolução. (Observe que $C^{[L]} \subseteq C$ pois utilizamos os mesmos processos de Poisson.) Então, aplicamos o Algoritmo 3 com conjunto inicial $C^{[L]}$ e definimos os valores de $\tilde{X}_s(i)$ e $\tilde{X}_s^{[L]}(i)$ para $s = 0$ a partir deste acoplamento.
   - Aplicamos o Algoritmo 5 utilizando a saída $V^{[L]}$ do Algoritmo 4 para $(\tilde{X}_s^{[L]}(i))_{0\leq s\leq t}$ independentemente da evolução $(\tilde{X}_s(i))_{0\leq s\leq t}$.

4.2 Correções em volume finito

Uma das aplicações dos procedimentos de simulação perfeita apresentada no Capítulo 3 foi a aproximação, em termos da distância $\bar{d}$, entre medidas com interações de alcance infinito e suas respectivas versões com interações de alcance truncado. Nesta seção, estenderemos a aplicação para comparar uma medida de interação infinita com sua versão cujas interações existem apenas entre sítios pertencentes a um conjunto finito.

Sejam $i \in \mathbb{Z}^d$ e $t > 0$ fixados. Considere $(C_s^{(i,t)})_{s\geq 0}$ o processo reverso associado à construção de $X_t(i)$, $T_{STOP}^{(i,t)}$ seu tempo de relaxamento e $N_{STOP}^{(i,t)}$ o número de saltos do processo. Estamos

interessados em escolher uma caixa finita de $\mathbb{Z}^d$ de tal forma que, com alta probabilidade, o conjunto $C_s^{(i,t)}$ esteja dentro desta caixa para todo $s \in [0, T_{STOP}^{(i,t)}]$. Isso será feito da seguinte forma: tomemos uma caixa $B_i(kL)$, onde $k = k(L)$ será escolhido de tal forma que $k(L) \to \infty$ quando $L \to \infty$ e

$$\lim_{L\to\infty} \mathbb{P}(C_s^{(i,t)} \cap (B_i(kL))^c \neq \emptyset \text{ para algum } s \in [0, T_{STOP}^{(i,t)}]) = 0\,. \tag{4.4}$$

A seguir, vamos definir um acoplamento entre a dinâmica estocástica de Ising e uma outra dinâmica na qual há interações apenas entre os sítios de $B_i(kL)$ de tal forma que (4.4) esteja satisfeita. Para um inteiro positivo $\bar{L} \geq 1$ fixado, definimos uma dinâmica estocástica de Ising $(Y_s^{[\bar{L}],(i)}, s \geq 0)$ com interação $J^{[\bar{L}],(i)}$ definida da seguinte forma:

$$J^{[\bar{L}],(i)}(j,\ell) = \begin{cases} \beta J(j,\ell), & \text{se } j \in B_i(\bar{L}) \text{ e } \ell \in B_i(\bar{L}) \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \tag{4.5}$$

Seja $\nu^{[\bar{L}],(i)}$ o modelo de Ising associado à interação $J^{[\bar{L}],(i)}$. Fixado $\eta(B_i(\bar{L})) \in A^{B_i(\bar{L})}$, observe que

$$\begin{aligned} &\nu^{[\bar{L}],(i)}(\{\sigma : \sigma(j) = a \,|\, \sigma(l) = \zeta(l) \text{ para todo } l \neq j\}) \\ &\qquad = \frac{1}{1 + \exp\Big\{2a \sum_{l \in B_i(\bar{L})} \beta J(j,l)\eta(l)\Big\}} \end{aligned} \tag{4.6}$$

para todo $a \in A$ e para toda configuração $\zeta \in A^{\mathbb{Z}^d}$ tal que $\zeta(B_i(\bar{L})) = \eta(B_i(\bar{L}))$. Esta escolha de interação faz a dinâmica "ignorar" a configuração fora de $B_i(\bar{L})$.

Com esta observação, podemos enunciar o seguinte

Teorema 4.2.1 *(Teorema de Correção em Volume Finito) Suponha que a condição (3.15) valha. Então, para todo $k \geq 1$, existe um acoplamento das dinâmicas $(X_s(i))_s$, com interação J, e $(Y_s^{[k\bar{L}],(i)}(i))_s$, com interação $J^{[\bar{L}],(i)}$, tal que, uniformemente em $t \geq 0$, temos que*

$$\mathbb{P}(Y_t^{[k\bar{L}],(i)}(i) \neq X_t(i)) \leq k^2\delta(\bar{L}) + (1-\gamma)^k\,, \tag{4.7}$$

onde $\delta(\bar{L})$ está definido em (3.26).

Demonstração. Observe que

$$\begin{aligned} &\mathbb{P}(C_s^{(i,t)} \cap (B_i(k\bar{L}))^c \neq \emptyset \text{ para algum } s \in [0, T_{STOP}^{(i,t)}]) \\ &\leq \sum_{m=1}^{k} \mathbb{P}\Big(\text{pelo menos um dos } m \text{ saltos foi maior que } \bar{L}; N_{STOP}^{(i,t)} = m\Big) + \mathbb{P}(N_{STOP}^{(i,t)} > k) \\ &\leq \sum_{m=1}^{k} m \sup_{i\in\mathbb{Z}^d} \mathbb{P}(K_1^{(i,t)} > \bar{L}) + (1-\gamma)^k = \frac{k^2+k}{2} \sup_{i\in\mathbb{Z}^d}(1 - e^{-\beta\sum_{j\notin B_i(\bar{L})}|J(i,j)|}) + (1-\gamma)^k \\ &\leq k^2\delta(\bar{L}) + (1-\gamma)^k\,, \end{aligned} \tag{4.8}$$

onde a segunda desigualdade segue diretamente do item 1 do Teorema 3.2.2.

A construção do acoplamento é equivalente ao que foi feito na Seção 4.1, com a diferença de que caso o processo reverso associado a $X_t(i)$ saia de $B_i(k\bar{L})$ antes de atingir seu tempo de relaxamento, construímos os dois processos reversos de forma independente, bem como os respectivos processos de atribuição de *spins*. Logo, uma quota superior para a probabilidade de discrepância entre as duas configurações no instante t é dada por (4.8), o que completa a demonstração do teorema. •

Este teorema é relevante por se tratar de uma *"correção de volume finito"*, uma vez que demonstra que, ao observarmos uma realização de uma medida de alcance infinito em um conjunto de sítios com cardinalidade suficientemente grande, o erro de aproximação em relação à sua versão de alcance finito é pequeno.

O seguinte corolário resume qual é o raio da caixa que devemos escolher para obtermos uma boa aproximação entre as medidas.

Corolário 4.2.2 *Sob a condição (3.15), ao escolhermos $k(\bar{L}) \to \infty$ tal que*

$$\lim_{\bar{L}\to\infty} k(\bar{L})^2\delta(\bar{L}) = 0\,, \tag{4.9}$$

temos que (4.4) está satisfeita.

Demonstração. Escolhendo $k(L)$ como em (4.9) e usando o fato de que e $0 < 1-\gamma < 1$, completamos a demonstração. •

Agora, seja $\nu^{[k\bar{L}]}$ o modelo de Ising relativo à interação $J^{[k\bar{L}],(i)}$. A partir do Teorema 4.2.1, podemos comparar os medidas μ e $\nu^{[k\bar{L}]}$ em termos da distância $\bar{d}$. Este é o conteúdo do próximo

Corolário 4.2.3 *Sob a condição (3.15), temos que*

$$\bar{d}(\mu, \nu^{[k\bar{L}]}) \leq k^2\delta(\bar{L}) + (1-\gamma)^k\,. \tag{4.10}$$

Demonstração. Segue imediatamente do Teorema 4.2.1. •

Capítulo 5

Aproximação das dinâmicas estocásticas via médias empíricas

Neste capítulo, apresentaremos o segundo resultado original desta Tese, o Teorema 5.2.1 (que será chamado, invariavelmente, de *Teorema de Aproximação Empírica*): ele garante que é possível construir um acoplamento de duas dinâmicas estocásticas de Ising estacionárias de tal forma que a proporção do tempo em que os *spins* assumem valores diferentes possa ser controlada.

Para demonstrarmos este teorema, precisaremos de algumas definições extras relativas a sequências fortemente misturadoras e de um teorema de grandes desvios (*large deviations*) relativo a esse tipo de sequências; isso será feito na Seção 5.1. A seção que vem a seguir será dedicada ao enunciado e à demonstração do Teorema 5.2.1.

5.1 Sequências fortemente misturadoras (*strongly mixing*)

Vamos apresentar algumas definições que serão importantes ao longo deste capítulo: Para quaisquer σ-álgebras $\mathcal{A}$ e $\mathcal{B}$, definimos o coeficiente α-*mixing*

$$\alpha(\mathcal{A},\mathcal{B}) = \sup_{A\in\mathcal{A},B\in\mathcal{B}} |\mathbb{P}(A\cap B) - \mathbb{P}(A)\mathbb{P}(B)|\,.$$

Seja $W_1, W_2, \ldots$ uma sequência de variáveis aleatórias dependentes e uniformemente limitadas, isto é,

$$\sup_{k\geq 1} ||W_k||_\infty < \infty\,,$$

onde $||Y||_\infty$ é o supremo da variável aleatória Y. Dizemos que a sequência $(W_k)_{k\geq 1}$ é fortemente misturadora (*strongly mixing*) se existe $c > 0$ tal que

$$\alpha(n) := \sup_{k\geq 1} \alpha(\mathcal{M}_k, \mathcal{G}_{k+n}) \leq \exp\{-cn\} \to 0 \text{ quando } n \to \infty\,, \tag{5.1}$$

onde $\mathcal{M}_k$ é a σ-álgebra gerada por $(W_l, l \leq k)$ e $\mathcal{G}_k$ é a σ-álgebra gerada por $(W_l, l \geq k)$.

A seguir, vamos enunciar o Teorema 1 de Merlevède, Peligrad e Rio (2009), que será fundamental para a demonstração do Teorema de Aproximação Empírica.

Teorema 5.1.1 *(Merlevède et al., 2009) Seja $(W_k)_{k\geq 1}$ uma sequência enumerável de variáveis aleatórias de média zero e fortemente misturadoras no sentido de (5.1). Suponha também que exista $M > 0$ tal que $\sup_{k\geq 1} ||W_k||_\infty \leq M$. Então, para quaisquer inteiro positivo $n \geq 4$ e $x \geq 0$, temos que*

$$\mathbb{P}\Big(\Big|\sum_{k=0}^{n-1} W_k\Big| \geq x\Big) \leq \exp\Big\{-\frac{Cx^2}{nM^2 + Mx(\ln n)(\ln\ln n)}\Big\} \tag{5.2}$$

onde $C > 0$ é uma constante que depende apenas de c. •

5.2 O Teorema de Aproximação Empírica

Antes de enunciarmos o teorema principal deste capítulo, vamos definir

$$\delta^*(L) := \frac{1}{\gamma}\delta(L). \tag{5.3}$$

Com isto, segue o enunciado do Teorema de Aproximação Empírica.

Teorema 5.2.1 *(Teorema de Aproximação Empírica) Suponha que*

$$\sup_{i\in\mathbb{Z}^d} \sum_{k=1}^{\infty} |B_i(k)| \Big(\sum_{j:||i-j||=k} |J(i,j)|\Big) < \infty\,. \tag{5.4}$$

Então, existe $\beta_c > 0$ tal que, para todo $\beta < \beta_c$, existe um acoplamento $(\tilde{X}_s, \tilde{X}_s^{[L]})$ dos processos estacionários $(X_s)_s$ e $(X_s^{[L]})_s$ de tal forma que, para quaisquer $t \gg \max\{4\gamma^{-1}, 2\gamma^{-1}\delta^*(L)\}$ e $y \geq \frac{2\delta(L)}{\gamma t - 1}$, temos que

$$\sup_{i\in\mathbb{Z}^d} \mathbb{P}\Big(\frac{1}{t}\int_0^t \mathbf{1}_{\{\tilde{X}_s^{[L]}(i)\neq \tilde{X}_s(i)\}} ds \geq 2\delta^*(L) + y\Big)$$
$$\leq \exp\left\{-\frac{C_1 t\Big(y - \frac{2\delta^*(L)}{\gamma t - 1}\Big)^2}{C_2 + 2\Big(y - \frac{2\delta^*(L)}{\gamma t}\Big)(\ln(1+\gamma t))(\ln\ln(1+\gamma t))}\right\}, \tag{5.5}$$

onde $C_1 > 0$ e $C_2 > 0$ são constantes que não dependem de t e y.

Demonstração. Primeiramente, vamos determinar o valor de β_c tal que para todo $\beta < \beta_c$, a condição (3.15),

$$\gamma = 1 - \sup_{i\in\mathbb{Z}^d} \sum_{k=1}^{\infty} |B_i(k)|\lambda_i(k) < 1\,,$$

seja satisfeita. Para todo $k \geq 0$, defina

$$S_i^{>k} = \sum_{j\notin B_i(k)} |J(i,j)|\,.$$

Para cada $i \in \mathbb{Z}^d$, temos que

$$\begin{aligned}\sum_{k=1}^{\infty} \lambda_i(k)|B_i(k)| &\leq 2d\lambda_i(1) + \sum_{k=2}^{\infty} |B_i(k)|(e^{-\beta S_i^{>k}} - e^{-\beta S_i^{>k-1}}) \\ &= 2de^{-\beta S_i^{>1}}(1 - e^{-\beta S_i^{>0}} e^{-\beta \sum_{j\in B_i(1)} |J(i,j)|}) \\ &\qquad + \sum_{k=2}^{\infty} |B_i(k)| e^{-\beta S_i^{>k}} (1 - e^{-\beta \sum_{j:||i-j||=k} |J(i,j)|}) \\ &\leq 2de^{-\beta S_i^{>1}}(1 - e^{-\beta S_i^{>0}} e^{-\beta \sum_{j\in B_i(1)} |J(i,j)|}) \\ &\qquad + \beta \sup_{i\in\mathbb{Z}^d} \Big(\sum_{k=2}^{\infty} |B_i(k)| \sum_{j:||i-j||=k} |J(i,j)| \Big) .\end{aligned}$$

Sob a condição do teorema, esta última expressão é finita. Portanto, a condição (3.15) pode ser lida como

$$\begin{aligned}&2d \sup_{i\in\mathbb{Z}^d} (e^{-\beta S_i^{>1}}(1 - e^{-\beta S_i^{>0}} e^{-\beta \sum_{j\in B_i(1)} |J(i,j)|})) \\ &+\beta \sup_{i\in\mathbb{Z}^d} \Big(\sum_{k=2}^{\infty} |B_i(k)| \sum_{j:||i-j||=k} |J(i,j)| \Big) < 1 .\end{aligned}$$

Finalmente, seja β_c a solução de

$$\begin{aligned}&2d \sup_{i\in\mathbb{Z}^d} (e^{-\beta S_i^{>1}}(1 - e^{-\beta S_i^{>0}} e^{-\beta \sum_{j\in B_i(1)} |J(i,j)|})) \\ &+\beta \sup_{i\in\mathbb{Z}^d} \Big(\sum_{k=2}^{\infty} |B_i(k)| \sum_{j:||i-j||=k} |J(i,j)| \Big) = 1 .\end{aligned}$$

Isso conclui a primeira parte do teorema e permite a utilização dos resultados apresentados anteriormente.

Agora, queremos uma quota inferior para a probabilidade

$$\mathbb{P}\Big(\frac{1}{t} \int_0^t \mathbf{1}_{\{\tilde{X}_s^{[L]}(i) \neq \tilde{X}_s(i)\}} ds \geq 2\delta^*(L) + y \Big) \tag{5.6}$$

para algum $y > 0$ que será escolhido de forma conveniente.

Seja $0 < \Delta < t$. Defina também $n = n(t) = \lceil t/\Delta \rceil$ (para todo número real x, definimos $\lceil x \rceil$ como sendo o menor número inteiro maior ou igual a x) e uma sequência de tempos $(\tilde{t}_k, k = 0, 1, \ldots, n)$ tal que $\tilde{t}_0 = 0$ e $\tilde{t}_{k+1} - \tilde{t}_k = \Delta$ para todo $k = 0, 1, \ldots, n-1$. Para simplificar a notação, definimos também

$$Y_s^{[L],(i)} = \mathbf{1}_{\{\tilde{X}_s^{[L]}(i) \neq \tilde{X}_s(i)\}}, \ s \geq 0. \tag{5.7}$$

Observe que

$$\frac{1}{t} \int_0^t Y_s^{[L],(i)} ds \leq \frac{1}{t} \sum_{k=0}^{n-1} \int_{\tilde{t}_k}^{\tilde{t}_{k+1}} Y_s^{[L],(i)} ds , \tag{5.8}$$

uma vez que $\tilde{t}_n = n\Delta \geq t$. Definimos a sequência de variáveis aleatórias

$$V_k = V_k^{[L],(i)} := \int_{\tilde{t}_k}^{\tilde{t}_{k+1}} Y_s^{[L],(i)} ds, \; k = 0, 1, \ldots, n-1.$$

Com isso, podemos escrever

$$\begin{aligned}\mathbb{P}\Big(\frac{1}{t}\int_0^t \mathbf{1}_{\{\tilde{X}_s^{[L]}(i) \neq \tilde{X}_s(i)\}} ds \geq 2\delta^*(L) + y\Big) &\leq \mathbb{P}\Big(\sum_{k=0}^{n-1} \int_{\tilde{t}_k}^{\tilde{t}_{k+1}} Y_s^{[L],(i)} ds \geq t(2\delta^*(L) + y)\Big) \\ &= \mathbb{P}\Big(\sum_{k=0}^{n-1} V_k \geq t(2\delta^*(L) + y)\Big). \end{aligned} \tag{5.9}$$

Para cada k, vamos definir os seguintes eventos:

$$A_k = \{T_L^{(i,\tilde{t}_{k+1})} < T_{STOP}^{(i,\tilde{t}_{k+1})}\} \; ; \; B_k = \{\tilde{X}_{\tilde{t}_k}^{[L]}(i) \neq \tilde{X}_{\tilde{t}_k}(i)\}.$$

Com isso, observe que podemos escrever

$$\begin{aligned} V_k &= \int_{\tilde{t}_k}^{\tilde{t}_{k+1}} Y_s^{[L],(i)} \mathbf{1}_{A_k} \mathbf{1}_{B_k^c} \, ds + \int_{\tilde{t}_k}^{\tilde{t}_{k+1}} Y_s^{[L],(i)} \mathbf{1}_{A_k^c} \mathbf{1}_{B_k^c} \, ds \\ &+ \int_{\tilde{t}_k}^{\tilde{t}_{k+1}} Y_s^{[L],(i)} \mathbf{1}_{B_k} \, ds \\ &\leq \int_{\tilde{t}_k}^{\tilde{t}_{k+1}} Y_s^{[L],(i)} \mathbf{1}_{A_k} \, ds + \int_{\tilde{t}_k}^{\tilde{t}_{k+1}} Y_s^{[L],(i)} \mathbf{1}_{B_k} \, ds \\ &\leq \Delta(\mathbf{1}_{A_k} + \mathbf{1}_{B_k}), \end{aligned} \tag{5.10}$$

uma vez que, sob o evento $A_k^c \cap B_k^c$, temos que $Y_s^{[L],(i)} = 0$ para todo $s \in [\tilde{t}_k, \tilde{t}_{k+1}]$.

Vamos definir uma nova sequência de variáveis aleatórias

$$Z_k = Z_k^{[L],(i)} := \mathbf{1}_{A_k} + \mathbf{1}_{B_k}, \; k = 0, 1, \ldots, n-1.$$

Observe que, por construção, esta sequência é formada por variáveis identicamente distribuídas. Com isso, temos que

$$\mathbb{P}\Big(\sum_{k=0}^{n-1} V_k \geq t(2\delta^*(L) + y)\Big) \leq \mathbb{P}\Big(\sum_{k=0}^{n-1} Z_k \geq \frac{t}{\Delta}(2\delta^*(L) + y)\Big) \leq \mathbb{P}\Big(\sum_{k=0}^{n-1} Z_k \geq (n-1)(2\delta^*(L) + y)\Big), \tag{5.11}$$

uma vez que

$$\left\lceil \frac{t}{\Delta} \right\rceil = n \Leftrightarrow \frac{t}{\Delta} \leq n < \frac{t}{\Delta} + 1. \tag{5.12}$$

Assumindo que

$$y \geq \frac{2\delta^*(L)}{\Delta t - 1} \geq \frac{2\delta^*(L)}{n-1} \tag{5.13}$$

e usando o fato de que $\mathbb{E}(Z_k) \leq 2\delta^*(L)$ para todo k, temos que

$$\begin{aligned}\mathbb{P}\Big(\sum_{k=0}^{n-1} Z_k \geq (n-1)(2\delta^*(L)+y)\Big) &= \mathbb{P}\Big(\sum_{k=0}^{n-1}(Z_k - 2\delta^*(L)) \geq (n-1)y - 2\delta^*(L)\Big)\\ &\leq \mathbb{P}\Big(\Big|\sum_{k=0}^{n-1}(Z_k - \mathbb{E}(Z_k))\Big| \geq (n-1)y - 2\delta^*(L)\Big)\\ &\leq \mathbb{P}\Big(\Big|\sum_{k=0}^{n-1}\tilde{Z}_k\Big| \geq (n-1)y - 2\delta^*(L)\Big) \qquad (5.14)\end{aligned}$$

onde, por simplificação, escrevemos

$$\tilde{Z}_k := Z_k - \mathbb{E}(Z_0),\ k = 0, 1, \ldots, n-1\,.$$

Agora, vamos mostrar que a sequência $(\tilde{Z}_k)_k$ é fortemente misturadora, o que é equivalente a mostrar que a sequência original $(Z_k)_k$ é fortemente misturadora, uma vez que esta é igual à sequência $(\tilde{Z}_k)_k$ transladada de um número fixado.

Tomemos um número inteiro $m \geq 1$ e, para simplificar a notação, defina $T^{(m)} = T_{STOP}^{(i,\tilde{t}_{m+1})}$. Então, para quaisquer a, b no conjunto $\{0, 1, 2\}$, temos que

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(Z_0 = a, Z_m = b) &= \mathbb{P}(Z_0 = a, Z_m = b, T^{(m)} \leq m\Delta) + \mathbb{P}(Z_0 = a, Z_m = b, T^{(m)} > m\Delta)\\ &= \mathbb{P}(Z_0 = a)\mathbb{P}(Z_m = b, T^{(m)} \leq m\Delta) + \mathbb{P}(Z_0 = a, Z_m = b, T^{(m)} > m\Delta) \qquad (5.15)\end{aligned}$$

uma vez que se o evento $\{T^{(m)} \leq m\Delta\}$ acontece, então Z_0 e Z_m são independentes, pela construção do processo reverso. Com isso, temos que

$$\begin{aligned}\alpha(m; a, b) &:= |\mathbb{P}(Z_0 = a, Z_m = b) - \mathbb{P}(Z_0 = a)\mathbb{P}(Z_m = b)|\\ &= |\mathbb{P}(Z_0 = a)[\mathbb{P}(Z_m = b, T^{(m)} \leq m\Delta) - \mathbb{P}(Z_m = b)] + \mathbb{P}(Z_0 = a, Z_m = b, T^{(m)} > m\Delta)|\\ &= |\mathbb{P}(Z_0 = a, Z_m = b, T^{(m)} > m\Delta) - \mathbb{P}(Z_0 = a)\mathbb{P}(Z_m = b, T^{(m)} > m\Delta)|\\ &\leq 2\mathbb{P}(T^{(m)} > m\Delta) \leq 2\exp\{-\gamma\Delta m\}\,. \qquad (5.16)\end{aligned}$$

Como

$$\lim_{m\to\infty} \sup_{(a,b)\in\{0,1,2\}^2} \alpha(m; a, b) = 0,$$

temos que a sequência $(Z_k)_k$ é fortemente misturadora.

Entretanto, para aplicarmos o Teorema 5.1.1, escolhemos

$$\Delta > \gamma^{-1}\ln 2$$

para que

$$\alpha(m; a, b) \leq \exp\{-cm\} \qquad (5.17)$$

para todo $m \geq 1$, onde $c = \gamma\Delta - \ln 2 > 0$. Além disso, escolhemos $M = 2$ e t de tal forma que

$$n \geq \frac{t}{\Delta} \geq 4 \Rightarrow t \geq 4\Delta \qquad (5.18)$$

e $t \gg 2\gamma^{-1}\delta^*(L)$. Finalmente, definimos $\Delta = \gamma^{-1}$ e

$$x = y - \frac{2\delta^*(L)}{n-1}\,.$$

Com isso, temos que

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}\Big(\Big|\sum_{k=0}^{n-1}\tilde{Z}_k\Big| \geq (n-1)y - 2\delta^*(L)\Big) &\leq \exp\Big\{-\frac{C[(n-1)y-2\delta^*(L)]^2}{n4+2[(n-1)y-2\delta^*(L)](\ln n)(\ln\ln n)}\Big\} \\
&= \exp\Big\{-\frac{C(n-1)x^2}{\frac{4n}{n-1}+2x(\ln n)(\ln\ln n)}\Big\} \\
&\leq \exp\left\{-\frac{C_1 n x^2}{C_2+2x(\ln n)(\ln\ln n)}\right\} \\
&\leq \exp\left\{-\frac{C_1\gamma t x^2}{C_2+2x(\ln(1+\gamma t))(\ln\ln(1+\gamma t))}\right\} \\
&= \exp\left\{-\frac{C_1 t\Big(y-\frac{2\delta^*(L)}{\gamma t-1}\Big)^2}{C_2+2\Big(y-\frac{2\delta^*(L)}{\gamma t}\Big)(\ln(1+\gamma t))(\ln\ln(1+\gamma t))}\right\}, \qquad (5.19)
\end{aligned}$$

onde a última desigualdade é consequência direta de (5.12).

Juntando (5.9), (5.11), (5.13), (5.14), (5.18) e (5.19), temos que

$$\begin{aligned}
&\mathbb{P}\Big(\frac{1}{t}\int_0^t \mathbf{1}_{\{\tilde{X}_s^{[L]}(i)\neq\tilde{X}_s(i)\}}ds \geq 2\delta^*(L)+y\Big) \\
&\qquad\qquad \leq \exp\left\{-\frac{C_1 t\Big(y-\frac{2\delta^*(L)}{\gamma t-1}\Big)^2}{C_2+2\Big(y-\frac{2\delta^*(L)}{\gamma t}\Big)(\ln(1+\gamma t))(\ln\ln(1+\gamma t))}\right\}.
\end{aligned}$$

Com isso, terminamos a demonstração o teorema. •

A maior dificuldade na demonstração do Teorema 5.2.1 está relacionada com a construção da sequência de variáveis fortemente misturadoras. A partir desta construção, o restante da demonstração segue de forma linear por meio do teorema de Merlevède et al. (2009).

Observe, além disso, que o Teorema de Aproximação Empírica leva em conta o acoplamento em apenas um sítio fixado de $\mathbb{Z}^d$. Contudo, o resultado pode ser estendido para qualquer conjunto $F \subset \mathbb{Z}^d$ finito. É exatamente isso que diz o seguinte

Corolário 5.2.2 *Seja $F \subset \mathbb{Z}^d$ finito. Então, sob as hipóteses do Teorema 5.2.1, temos que*

$$\begin{aligned}
&\mathbb{P}\Big(\frac{1}{t}\int_0^t \mathbf{1}_{\{\tilde{X}_s^{[L]}(F)\neq\tilde{X}_s(F)\}}ds \geq 2|F|(\delta^*(L)+y)\Big) \\
&\qquad\qquad \leq |F|\exp\left\{-\frac{C_1 t\Big(y-\frac{2\delta(L)}{\gamma t-1}\Big)^2}{C_2+2\Big(y-\frac{2\delta(L)}{\gamma t}\Big)(\ln(1+\gamma t))(\ln\ln(1+\gamma t))}\right\}. \qquad (5.20)
\end{aligned}$$

Demonstração. Observe que

$$\frac{1}{t}\int_0^t \mathbf{1}_{\{\tilde{X}_s^{[L]}(F)\neq\tilde{X}_s(F)\}}ds \leq \sum_{i\in F}\frac{1}{t}\int_0^t \mathbf{1}_{\{\tilde{X}_s^{[L]}(i)\neq\tilde{X}_s(i)\}}ds\,.$$

Com isso, é imediato que

$$\begin{aligned}\mathbb{P}\Big(\frac{1}{t}\int_0^t \mathbf{1}_{\{\tilde{X}_s^{[L]}(F)\neq\tilde{X}_s(F)\}}ds \geq 2|F|(\delta^*(L)+y)\Big)&\\ \leq \sum_{i\in F}\mathbb{P}\Big(\frac{1}{t}\int_0^t \mathbf{1}_{\{\tilde{X}_s^{[L]}(i)\neq\tilde{X}_s(i)\}}ds \geq 2(\delta^*(L)+y)\Big)&\\ \leq |F|\sup_{i\in\mathbb{Z}^d}\mathbb{P}\Big(\frac{1}{t}\int_0^t \mathbf{1}_{\{\tilde{X}_s^{[L]}(i)\neq\tilde{X}_s(i)\}}ds \geq 2(\delta^*(L)+y)\Big).&\end{aligned}$$

Aplicando o Teorema 5.2.1, chegamos ao resultado desejado. •

Uma aplicação do Teorema de Aproximação Empírica é apresentada a seguir. Sejam $F\subset\mathbb{Z}^d$ finito e $t>0$. Considere uma realização estacionária do processo $(X_s)_{0\leq s\leq t}$ construída como foi feito no Capítulo 4 e sua projeção no conjunto F, a saber, $(X_s(F))_{0\leq s\leq t}$. Para uma configuração fixada $\eta(F)\in A^F$, definimos o seguinte estimador:

$$\hat{p}_t(\eta(F)) := \frac{1}{t}\int_0^t \mathbf{1}_{\{X_s(F)=\eta(F)\}}ds\,. \tag{5.21}$$

Para o processo truncado estacionário $(X_s^{[L]})_{0\leq s\leq t}$ e sua projeção $(X_s^{[L]}(F))_{0\leq s\leq t}$ definimos de forma equivalente o seguinte estimador:

$$\hat{p}_t^{[L]}(\eta(F)) := \frac{1}{t}\int_0^t \mathbf{1}_{\{X_s^{[L]}(F)=\eta(F)\}}ds\,. \tag{5.22}$$

Agora, seja $(\tilde{X}_s(F),\tilde{X}_s^{[L]}(F))_{0\leq s\leq t}$ as projeções em F de um acoplamento dos processos originais construído como na Seção 4.1 e que satisfaz as hipóteses do Teorema de Aproximação Empírica. O seguinte corolário é uma aplicação direta deste teorema.

Corolário 5.2.3 *Sejam $\hat{p}_t$ e $\hat{p}_t^{[L]}$ os estimadores relativos ao acoplamento $(\tilde{X}_s(F),\tilde{X}_s^{[L]}(F))_{0\leq s\leq t}$. Sob as hipóteses do Teorema 5.2.1, temos que*

$$\begin{aligned}\sup_{\eta(F)\in A^F}\mathbb{P}\Big(\Big|\hat{p}_t(\eta(F))-\hat{p}_t^{[L]}(\eta(F))\Big| \geq 2|F|(\delta^*(L)+y)\Big)&\\ \leq |F|\exp\left\{-\frac{C_1 t\Big(y-\frac{2\delta(L)}{\gamma t-1}\Big)^2}{C_2+2\Big(y-\frac{2\delta(L)}{\gamma t}\Big)(\ln(1+\gamma t))(\ln\ln(1+\gamma t))}\right\}.&\end{aligned} \tag{5.23}$$

Demonstração. Observe que

$$\Big|\hat{p}_t(\eta(F))-\hat{p}_t^{[L]}(\eta(F))\Big| \leq \frac{1}{t}\int_0^t \Big|\mathbf{1}_{\{X_s(F)=\eta(F)\}}-\mathbf{1}_{\{X_s^{[L]}(F)=\eta(F)\}}\Big|ds \leq \frac{1}{t}\int_0^t \mathbf{1}_{\{\tilde{X}_s^{[L]}(F)\neq\tilde{X}_s(F)\}}ds\,.$$

Com isso, basta aplicar diretamente o Teorema 5.2.1. •

Capítulo 6

Discussão final

Nesta Tese, discutimos alguns resultados relacionados a sistemas de *spins* de longo alcance, em especial, aqueles que tem o modelo de Ising como suas respectivas probabilidades invariantes. Na mesma linha de Galves et al. (2010), utilizando a construção do processo reverso e os algoritmos de simulação perfeita, apresentamos uma quota superior para a distância $\bar{d}$ entre o modelo de Ising de alcance infinito e sua versão restrita a uma caixa finita de $\mathbb{Z}^d$. Além disso, apresentamos um resultado original sobre o comportamento da proporção do tempo em que dois processos estacionários acoplados (tendo μ e $\mu^{[L]}$ como respectivas probabilidades invariantes), restritos a uma caixa finita, assumem configurações diferentes entre si.

Apesar de usarmos o modelo de Ising como probabilidade invariante, os resultados apresentados nesta Tese podem ser estendidos sem maiores dificuldades para medidas de Gibbs nas quais a interação J não é restrita somente a pares de sítios. De fato, os resultados de Galves et al. (2010) são baseados nas medidas de Gibbs, das quais o modelo de Ising é um caso particular.

Como foi visto ao longo desta Tese, a possibilidade de decompor a taxa de um sistema de *spins* em uma combinação linear convexa de taxas de alcance finito tem um papel fundamental na construção dos algoritmos de simulação perfeita das medidas de probabilidades originais e do acoplamento entre as dinâmicas estocásticas.

A condição (5.4) garante a existência de um β_c tal que, para todo $\beta < \beta_c$, os procedimentos de simulação perfeita e acoplamento enunciados ao longo desta Tese são bem sucedidos (e, em particular, garante a unicidade da probabilidade invariante associada à medida de Gibbs). Em outras palavras, os resultados apresentados são válidos em condições de *alta temperatura*: em termos de Mecânica Estatística, a constante β é interpretada como uma quantidade inversamente proporcional à temperatura T do sistema que está sendo estudado. Logo, a condição (5.4) pode ser vista como um critério para determinar a ausência de transição de fase do sistema.

Desta forma, é razoável comparar nosso critério com algum outro critério conhecido na literatura em uma situação especial. Como um exemplo deste tipo de comparação, considere o caso $d = 1$ (caso unidimensional) e defina a interação aos pares (modelo de Ising)

$$J(i,j) := J(i-j) = C|i-j|^{-\alpha} \tag{6.1}$$

para alguma constante $C > 0$ e $\alpha > 1$. Então, a hipótese (5.4) se resume a

$$\sup_{i\in\mathbb{Z}} \sum_{k=1}^{\infty} (2k+1)(|J(i,i-k)| + |J(i,i+k)|) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2C(2k+1)}{k^{\alpha}} < \infty\,. \tag{6.2}$$

A soma acima é finita se e somente se $\alpha > 2$ e, portanto, temos unicidade das probabilidades invariantes das respectivas dinâmicas estocásticas para todo C, onde β_c é uma função de C. Neste caso, estamos em uma situação de ausência de transição de fase.

De acordo com o enunciado do Teorema III.8.2 de Simon (1993), para todo C, não há transição de fase no modelo de Ising se

$$\sum_{k=1}^{\infty} kJ(k) < \infty\,, \tag{6.3}$$

o que é verdade para todo $\alpha > 2$. Sendo assim, nossa condição (5.4) é mais restritiva que a condição (6.3) neste exemplo.

Para $d \geq 2$, a condição (5.4) torna-se cada vez mais restritiva à medida que a dimensão do espaço de sítios aumenta, uma vez que $|B_i(k)|$ é proporcional a k^d e, portanto, as probabilidades $\lambda_i(k)$ para $k \geq 1$ tendem a ficar cada vez menores para satisfazerem a hipótese

$$\sup_{i\in\mathbb{Z}^d} \sum_{k\geq 1} |B_i(k)|\lambda_i(k) < 1\,. \tag{6.4}$$

Como uma sugestão para pesquisas futuras, recomenda-se investigar a possibilidade de se replicar nossos resultados em condições menos restritivas. Em outras palavras, uma pergunta importante a ser respondida é a seguinte: Existe um $\bar{\beta} > \beta_c$ tal que para todo $\beta < \bar{\beta}$, ainda é possível obter resultados como aqueles foram apresentados nesta Tese? Esta não é uma pergunta fácil de ser respondida, uma vez que (5.4) implica (6.4), que é uma hipótese fundamental para que os algoritmos de simulação perfeita e de acoplamento sejam bem sucedidos.

Uma segunda sugestão para pesquisa está relacionada com a quota superior apresentada no Teorema de Aproximação Empírica, cuja demonstração passou pela construção de uma sequência α-*mixing* (ou seja, fortemente misturadora). Comets et al. (2002), ao estudarem cadeias de ordem infinita, apresentaram um esquema de simulação perfeita no qual a condição de mistura era do tipo γ-*mixing*, ou seja, controla-se o termo

$$|\mathbb{P}(B \,|\, A) - \mathbb{P}(B)|\,,$$

o que é mais forte do que controlar o termo

$$|\mathbb{P}(A \cap B) - \mathbb{P}(A)\mathbb{P}(B)|\,,$$

que aparece na definição de sequências fortemente misturadoras. Uma pergunta natural, portanto, é a seguinte: É possível construir uma sequência γ-*mixing* que "melhore" o Teorema de Aproximação Empírica? Esta é uma das perguntas mais interessantes que podem ser feitas sobre os processos apresentados ao longo desta Tese.

Referências Bibliográficas

[BG77] F. Bertein e A. Galves. Une classe de systèmes de particules stable par association. *Z. Wahrscheinlichkeitstheorie verw. Gebiete*, 41:73–85, 1977.

[BK93] M. Bramson e S. Kalikow. Non-uniqueness in g-functions. *Israel J. Math.*, 84:153–160, 1993.

[CFF02] F. Comets, R. Fernández e P.A. Ferrari. Processes with long memory: regenerative construction and perfect simulation. *Ann. Appl. Prob.*, 12(3):921–943, 2002.

[CGL08] P. Collet, A. Galves e F. Leonardi. Random perturbations of stochastic processes with unbounded variable length memory. *Elec. J. Prob.*, 13:1345–1361, 2008.

[CL12] P. Collet e F. Leonardi. Loss of memory of Hidden Markov Models and Lyapunov exponents. Disponível em http://arxiv.org/abs/0908.0077, 2012.

[Dob71] R.L. Dobrushin. Markov processes with a large number of locally interacting components: existence of a limit process and its ergodicity. *Problems. Inform. Transmission*, 7:149–164, 1971.

[GLO10] A. Galves, E. Löcherbach e E. Orlandi. Perfect Simulation of Infinite Range Gibbs Measures and Coupling with Their Finite Range Approximations. *J. Stat. Phys.*, 138:476–495, 2010.

[Har76] T.E. Harris. On a class of set-valued Markov processes. *Ann. Prob.*, 4:175–194, 1976.

[Lig85] T.M. Liggett. *Interacting Particle Systems.* Springer-Verlag, New York, 1985.

[MPR09] F. Merlevède, M. Peligrad e E. Rio. Bernstein inequality and moderate deviations under strong mixing conditions. *High Dimensional Probability V: The Luminy Volume*, 5:273–292, 2009.

[PW96] J. Propp e D. Wilson. Exact sampling with coupled Markov chains and applications to statistical mechanics. *Random Structures and Algorithms*, 9:232–252, 1996.

[Sim93] B. Simon. *The Statistical Mechanics of Lattice Gases, Vol. I.* Princeton University Press, 1993.

[Spi69] F. Spitzer. *Random processes defined through the interaction of an infinite particle system*, volume 89 of *Lecture Notes in Mathematics.* Springer, 1969.

[Spi70] F. Spitzer. Interaction of Markov processes. *Adv. Math.*, 5:246–290, 1970.