UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
FACULDADE DE FILOSOFIA, CIÊNCIAS E LETRAS DE RIBEIRÃO PRETO
PROGRAMA DE FÍSICA APLICADA À MEDICINA E BIOLOGIA

**Transição entre os comportamentos estendido e localizado
em caminhadas estocásticas parcialmente auto-repulsivas
em sistemas desordenados unidimensionais**

Juliana Militão da Silva Berbert

Ribeirão Preto
2009

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
FACULDADE DE FILOSOFIA, CIÊNCIAS E LETRAS DE RIBEIRÃO PRETO
PROGRAMA DE FÍSICA APLICADA À MEDICINA E BIOLOGIA

**Transição entre os comportamentos estendido e localizado
em caminhadas estocásticas parcialmente auto-repulsivas
em sistemas desordenados unidimensionais**

Juliana Militão da Silva Berbert

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada à Medicina e Biologia da Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto da Universidade de São Paulo como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Física Aplicada à Medicina e Biologia.

Orientador: Prof. Dr. Alexandre Souto Martinez

Ribeirão Preto, Agosto de 2009.

AUTORIZO A REPRODUÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE DOCUMENTO, POR MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Berbert, J.M.

Transição entre os comportamentos estendido e localizado em caminhadas estocásticas parcialmente auto-repulsivas em sistemas desordenados unidimensionais / Juliana Militão da Silva Berbert; orientador Prof. Dr. Alexandre Souto Martinez.

– Ribeirão Preto/SP, 2009.

104 f.

Dissertação (Mestrado – Programa de Pós-Graduação em Física Aplicada à Medicina e Biologia) – Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto da Universidade de São Paulo.

Sistemas complexos, Sistemas fora do equilíbrio, Sistemas desordenados, Caminhadas deterministas, Caminhadas estocásticas, Sítios acessíveis, Envelhecimento, Transição vítrea, Problemas de otimização.

Banca Examinadora:

Dedicatória

Ao meu avô Simplício Militão da Silva e à minha mãe Marlene Militão da Silva Berbert.

Agradecimentos

A minha mãe Marlene Militão da Silva Berbert, minha primeira parceira de estudos. Aos meus queridos irmãos Guilherme Militão da Silva Berbert e Cláudia Militão da Silva Berbert pelo carinho e conforto. A minha família pelo apoio ao meu trabalho.

Ao Guilherme Cunha Ribeiro, que tem acompanhado minha jornada e está sempre presente e sempre me ajudando.

Ao meu orientador Alexandre Souto Martinez, que esteve presente durante a realização do trabalho, me ajudando, orientando e me incentivando na rotina acadêmica.

Aos colegas de trabalho Brenno Caetano Troca Cabella, Marcelo Alves Pereira, Aquino Espindola, Leandro Rizzi, Rafael Frigori, César Terçariol, Wilnice, Rodrigo Gonçalves, Fernanda, Matheus Mendonça e Luiz Guidolin que proporcionaram boas discussões na hora do almoço e do café.

Ao professor Jorge Viñals e seus alunos de doutorado Mathieu Gaudreault, Adriano Ferreira, Xusheng Zhang e mestrado Timothy Cox, pela orientação e discussões durante minha visita ao grupo “Nonlinear Dynamics, Pattern Formation, and Biophysics” no departamento de Física da McGill University, Montreal, Quebec, Canada.

Ao professores Vanessa Rolnik Artioli, Eder Rezende, Nelson Alves, Osame Kinouchi Filho, Oswaldo Baffa Filho e Ubiraci Pereira da Costa Neves pela orientação nas disciplinas que cursei. Ao coordenador da pós-graduação professor Marcelo Mulato.

Aos funcionários do Departamento de Física e Matemática Fábio José Moretti, Adriano de Jesus Holanda, Nilza Marina Leone Marino, Rita de Cassia Ribeiro, Sonia Aparecida Nali de Paula e Carlos Alberto Brunello pela presteza.

Ao Departamento de Física e Matemática pelo suporte ao trabalho.

Ao CNPq pelo apoio financeiro durante o trabalho realizado no Departamento de Física e Matemática e ao CBIE (Canadian Bureau for International Education) pelo suporte durante os seis meses de estadia em Montreal, QC, Quebec, Canadá.

*“... E rodopio pelo infinito
É maior que eu,
É bonito...”*

Resumo

BERBERT, J.M.. **Transição entre os comportamentos estendido e localizado em caminhadas estocásticas parcialmente auto-repulsivas em sistemas desordenados unidimensionais.** Dissertação (Mestrado) – Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto, 2009.

Considere N pontos distribuídos de forma aleatória e uniforme num hipercubo d -dimensional. Cada ponto representa um sítio num meio desordenado. Um caminhante explora este meio saltando para os sítios mais próximos, que não tenham sido visitados nos últimos μ (memória) passos, inclusive o próprio sítio. A trajetória do caminhante é composta de uma parte transiente e de uma parte periódica (ciclos). Neste caso, o viajante pode ou não explorar todos espaço disponível. A partir de uma memória crítica, ocorre uma transição entre os regimes de exploração localizado e estendido. Para sistemas unidimensionais, essa transição ocorre na memória crítica $\mu_1 = \log_2 N$. A regra determinista pode ser suavizada, a fim de considerar situações mais realistas, com a inclusão do parâmetro estocástico T (temperatura). Agora, os movimentos do caminhante são definidos por uma função densidade de probabilidade (PDF) que é parametrizada por T e por uma função custo, que cresce à medida que a distância entre os sítios cresce. A PDF é escolhida de forma a favorecer saltos para sítios mais próximos. Com o aumento da temperatura, o caminhante pode sair de ciclos e estender sua exploração. Aqui, nós apresentamos os estudos analíticos e numéricos sobre a influência da temperatura e da memória crítica na exploração de um meio desordenado unidimensional.

Palavras-chave: Sistemas complexos, Sistemas fora do equilíbrio, Sistemas desordenados, Caminhadas deterministas, Caminhadas estocásticas, Sítios acessíveis, Envelhecimento, Transição vítrea, Problemas de otimização.

Abstract

BERBERT, J.M.. **Transition between the extended and localized regimes in stochastic partially self-avoiding walks in one-dimensional disordered systems.** Dissertation (Master) – Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto, 2009.

Consider N sites randomly and uniformly distributed in a d -dimensional hypercube. A walker explores this disordered medium going to the nearest site, which has not been visited in the last μ (memory) steps. The walker trajectory is composed of a transient part and a periodic part (cycles). In this case, travelers can or cannot explore all available space, given rise to a crossover at critical memory, for one-dimensional systems $\mu_1 = \log_2 N$, between localized and extended regimes. The deterministic rule can be softened to consider more realistic situations with the inclusion of a stochastic parameter T (temperature). In this case, the walker movement is defined by a probability density function (PDF) that is parameterized by T and a cost function, which increases as the distance among sites increases. The PDF is chosen to favor hops to nearest sites. As the temperature increases, the walker can escape from cycles and extend the exploration. Here we report the analytical and numerical studies of the influence of the temperature and the critical memory in the exploration of a one-dimensional disordered system.

Keywords: Complex systems, Systems out-of-equilibrium, Disordered systems, Deterministic walk, Stochastic walk, Accessible sites, Aging, Glass transition, Optimization problems.

Sumário

Dedicatória	p. vii
Agradecimentos	p. ix
Resumo	p. xiii
Abstract	p. xv
1 Introdução	p. 1
2 Aspectos da Caminhada do Turista	p. 3
2.1 Representação do Meio Desordenado para o Problema da Caminhada do Turista	p. 3
2.1.1 Estatística de classificação de vizinhança	p. 4
2.1.2 Grafo do turista	p. 6
2.2 Distribuição espacial de Poisson e Estatística de Vizinhança	p. 7
2.2.1 Distribuição dos Sítios: Distribuição de Poisson	p. 8
2.2.2 Distribuição de Distâncias de Primeiros Vizinhos	p. 10
2.2.3 Distribuição de Distâncias de Segundos Vizinhos	p. 11
2.2.4 Distribuição de Distâncias de k -ésimos Vizinhos	p. 12
2.3 Caminhada Determinista do Turista	p. 15
2.3.1 Turista preguiçoso	p. 16
2.3.2 Turista sem memória	p. 16
2.3.3 Turista com memória em sistemas unidimensionais	p. 17
2.4 Caminhada Estocástica do Turista	p. 19

2.4.1	Turista preguiçoso em sistemas com dimensionalidade arbitrária . . .	p. 20
2.4.2	Turista sem memória em sistemas unidimensionais	p. 23
2.4.3	Comentários	p. 25
3	Modelo Analítico da Caminhada Estocástica do Turista	p. 27
3.1	Desenvolvimento do modelo	p. 28
3.1.1	Memória $\mathbb{M}^{(\mu)}(t) = \mathbb{1} - \sum_{k \in \mathbb{K}} S_k\rangle \langle S_k $	p. 28
3.1.2	Custo $\mathbb{H}$	p. 29
3.1.3	Densidade $\rho^{(\beta, \mu)}(t) = \mathbb{M}^{(\mu)}(t) e^{-\beta \mathbb{H}}$	p. 29
3.1.4	Probabilidade de salto a partir do sítio S_i : $\mathbb{P}_i^{(\beta, \mu)}(t)$	p. 30
3.2	Probabilidade de Sair do Sítio Inicial S_i e Andar N_p Passos	p. 31
3.2.1	Arbitrários passos considerando apenas um caminho entre S_i e S_j . .	p. 31
3.2.2	Probabilidade de salto entre sítios no limite de alta temperatura . . .	p. 34
3.2.3	Probabilidade de salto entre sítios no limite de baixa temperatura . . .	p. 35
3.2.3.1	Memória $\mu = 0$	p. 35
3.2.3.2	Memória $\mu = 1$	p. 37
3.2.3.3	Memória $\mu = 2$	p. 38
3.2.3.4	Memória $\mu = 3$	p. 42
4	Implementação Computacional da Caminhada Estocástica do Turista	p. 47
4.1	Geração de Mapas do Ambiente Aleatório	p. 48
4.2	Cálculo das Tabelas Usadas nas Tomadas de Decisão da Caminhada do Turista	p. 51
4.3	Realização da Caminhada Estocástica	p. 52
4.3.1	Procedimento para cálculo de $P_{j,i}^{(\beta, \mu)}$	p. 53
4.3.2	Validação do algoritmo	p. 55
5	Resultados Numéricos da Caminhada Estocástica do Turista	p. 57

<i>Sumário</i>	iii
6 Conclusões	p. 67
7 Perspectivas	p. 71
Apêndice A – Algoritmo da Caminhada do Turista em C++	p. 77
A.1 Código-fonte para a geração do meio desordenado e das tabelas	p. 77
A.2 Código-fonte para as tomadas de decisão da caminhada estocástica do turista	p. 80
Apêndice B – Algoritmo Random32 em C++	p. 83
Referências	p. 85
Anexo I	p. 89
Anexo II	p. 97

1 Introdução

Caminhadas aleatórias e técnicas estocásticas tornaram-se comum em quase todos os ramos da ciência e da engenharia. Estes métodos se aplicam especialmente em estudos de fenômenos naturais, e apresentam uma grande variedade de aplicações [1, 2]. As caminhadas aleatórias apresentam sua origem na análise de movimento de partículas em fluidos, por exemplo uma partícula de pó se movendo sobre uma gota de água. Pode-se observar o emprego de caminhadas aleatórias implementadas em redes regulares ou em sistemas desordenados. Um clássico exemplo de aplicação de caminhadas aleatórias em meios desordenados é na resolução do Problema do Caixeiro Viajante (PCV), no qual um caminhante (caixeiro) sabe *a priori* a localização de todos os sítios (cidades) do meio desordenado. Este caixeiro começa sua caminhada numa dada cidade e deve visitar todas as outras cidades uma vez e retornar a primeira através do menor caminho.

Por ser um problema não-polinomial (NP), estudos analíticos e numéricos do PCV são notavelmente complicados. Hoje em dia, os métodos numéricos mais comuns usados para lidar com o problema PCV são o *recozimento simulado* e o *algoritmo genético*. Embora estes métodos sejam consolidados, eles apresentam alto custo computacional. Sendo assim, métodos alternativos, que reduzam o custo computacional, são desejáveis.

Embora não tão estudadas quanto as caminhadas aleatórias, as caminhadas deterministas também despertam grande interesse entre físicos e matemáticos. Lima et.al. [3], em 2001, apresentaram uma nova maneira de explorar sistemas desordenados, com um caminhante determinista que se move com memória μ . A caminhada ficou, então, conhecida como “Caminha do Turista” (CT) [4] e, devido à memória do caminhante, esta caminhada é parcialmente auto-repulsiva. Diferentemente do PCV, na CT, o caminhante precisa conhecer apenas informação local para garantir uma boa exploração do meio desordenado [5, 6]. Seguindo a regra determinista de ir para o sítio mais próximo que não tenha sido visitado nos últimos μ passos precedentes, foi encontrado que mesmo com baixa memória o caminhante pode explorar todo o meio desordenado. A memória mínima que permite uma exploração estendida em sistemas unidimensionais é chamada de memória crítica $\mu_1 = \log_2 N$, como mostrado na seção 2.3, na

revisão da Caminhada Determinista do Turista.

Uma versão estocástica desta caminhada foi investigada por Martinez et. al. [7] em sistemas com dimensionalidade arbitrária d e um caminhante com memória $\mu = 0$. Risau-Gusman et. al. [8] examinaram esta caminhada estocástica em sistemas unidimensionais e caminhantes com memória $\mu = 1$. Variando a estocasticidade da caminhada, através de uma temperatura formal do meio desordenado, a dinâmica do caminhante apresenta comportamentos distintos. Para altos valores de temperatura o caminhante visita todos os sítios num comportamento de exploração estendida. Já, no limite de baixas temperaturas, a evolução do sistema apresenta uma dinâmica de envelhecimento, na qual, neste caso, o caminhante fica preso no regime de exploração localizada, mas continua visitando alguns sítios novos do meio desordenado. A transição entre estes regimes de exploração se caracteriza por uma transição do tipo vítrea [9], como no modelo “Trap Model” de Bouchaud [10], e esta transição foi encontrada tanto para $\mu = 0$ quanto para $\mu = 1$.

Nosso objetivo, agora, é examinar a caminhada do turista variando conjuntamente a temperatura e a memória do caminhante em meios desordenados unidimensionais. Investigamos o comportamento desta caminhada, a fim de entender como a exploração do meio se altera quando estas grandezas variam, e qual a relação entre estas grandezas que caracteriza a transição entre os regimes localizado e estendido. Para isso desenvolvemos uma nova formulação analítica e implementação computacional usando o método Monte Carlo.

Esta dissertação está organizada como segue: no Capítulo 2 relatamos os principais aspectos e resultados conhecidos da Caminhada do Turista, abrangendo a descrição do meio desordenado sobre o qual ocorre a caminhada, e as regras da caminhada nas versões puramente determinista e estocástica. No Capítulo 3 apresentamos o formalismo desenvolvido e as dificuldades de uma descrição analítica da Caminhada Estocástica do Turista (CET). O Capítulo 4 detalha o procedimento usado para implementar a CET usando método Monte Carlo. Já no Capítulo 5 os resultados numéricos são analisados. No Capítulo 7 retornamos aos cálculos analíticos e mostramos nossas perspectivas a fim de obter, analiticamente, a transição entre os regimes de exploração localizada e estendida. Por último, no Capítulo 6 apresentamos os principais resultados e nossas conclusões.

Podemos destacar que os resultados numéricos forneceram o diagrama de transição entre os regimes exploratórios da caminhada estocástica do turista (Fig. 5.7). Além disso, estabelecemos a relação entre as grandezas temperatura, memória, tamanho do meio desordenado e número de passos da caminhada (Eq. (5.6)).

2 *Aspectos da Caminhada do Turista*

Neste capítulo, descrevemos os principais aspectos e resultados conhecidos da Caminhada do Turista. Começamos com a descrição de um meio desordenado sobre o qual ocorre a caminhada. Revisamos a Caminhada Determinista do Turista e mostramos casos especiais do turista preguiçoso, do turista sem memória e do turista com memória em meios desordenados unidimensionais. Mostramos também os resultados já conhecidos da Caminhada Estocástica do Turista: turista preguiçoso em meios com dimensionalidade arbitrária, e turista sem memória em meios unidimensionais.

2.1 Representação do Meio Desordenado para o Problema da Caminhada do Turista

Considere um meio desordenado composto por N sítios representando, por exemplo, focos de alimentação, como flores ou árvores, poços de água, ilhas, etc [7]. Um método usual para construir esse meio desordenado consiste em distribuir aleatoriamente N sítios num hipercubo de dimensionalidade d com arestas unitárias. Dessa forma, um meio desordenado é definido com cada coordenada de cada sítio, $x_i^{(k)}$, $i = 1, 2, \dots, N$ e $k = 1, 2, \dots, d$, sendo definida de acordo com uma distribuição aleatória e uniforme ao longo destas arestas.

Neste meio, pode-se determinar a distância entre pares de quaisquer dois sítios e estabelecer uma estatística de vizinhança entre os sítios. A distância entre os sítios S_i e S_j pode ser dada por uma distância euclidiana normalizada $D_{j,i}$. Por exemplo, para normalizar a distância entre quaisquer dois sítios, pode-se dividir esta distância pela separação média dos sítios deste meio.

Podemos compreender geometricamente a separação média entre sítios, se imaginarmos um meio com N sítios delimitado por um hipercubo de d dimensões com arestas de comprimento L . A cada sítio deve-se associar um hipercubo, também d -dimensional, com arestas de comprimento dado pela separação média ℓ entre sítios. Agora, se assumirmos que estes hipercubos **não** se sobrepõem, podemos escrever $N\ell^d = L^d$ de onde obtemos a separação média

$\ell = LN^{-1/d}$. Assim, vamos considerar a distância euclidiana normalizada:

$$D_{j,i} = \frac{N^{1/d}}{L} \left\{ \sum_{k=1}^d \left[x_i^{(k)} - x_j^{(k)} \right]^2 \right\}^{1/2}. \quad (2.1)$$

Este procedimento preserva a densidade sítios constante à medida que a dimensionalidade do meio desordenado varia, tornando possível a comparação de sistemas com diferentes dimensionalidades. Em nossos estudos, usamos $d = 1$ e $L = 1$, desta forma, a separação média entre os sítios é simplesmente

$$\ell = \frac{1}{N}. \quad (2.2)$$

Usamos a distância euclidiana normalizada a fim de que nossos resultados sejam comparados com futuros resultados de sistemas com dimensionalidade maior que 1.

Ao longo desta seção, mostramos um estudo das características estáticas do meio aleatório que sustenta as realizações da caminhada do Turista e algumas propriedades geométricas do meio.

2.1.1 Estatística de classificação de vizinhança

Podemos abordar a estatística de vizinhança do meio desordenado pelo *Problema do Ponto Aleatório* (RPP, do inglês “random point problem”). Veja que, no meio que estabelecemos anteriormente, os sítios representam os pontos no RPP.

A probabilidade $P_{m,n}^{(d,N)}$ de que um ponto arbitrário seja o m -ésimo vizinho mais próximo de seu próprio n -ésimo vizinho mais próximo, no RPP, foi inicialmente estudada por Clark e Evans [11] e Clark [12] em alguns aspectos de padrão espacial em populações biológicas (plantas). Eles cunharam o termo de vizinhos reflexivos para o caso $m = n$. Seus trabalhos foram corrigidos por Dacey [13] ($m = n > 1$) no contexto de análise geográfica e então generalizado (para $m \neq n$) por Cox [14]. Chamamos $P_{m,n}^{(d,N)}$ de *Probabilidades de Cox*. Estas probabilidades foram calculadas por Terçariol et. al. [15] usando apenas a distribuição de pontos por um processo de Poisson, ao invés de calcular para diferentes distribuições de probabilidades como no artigo original [14]. Dessa maneira, diferentemente de Cox, Terçariol et. al. forneceram uma expressão em termos de funções e distribuições conhecidas (multinomial, binomial e hipergeométrica). A probabilidade de Cox é escrita como:

$$\frac{P_{m,n}^{(d)}}{P_{1,1}^{(d)}} = \sum_{i=1}^{\min(m,n)} \text{Mult} \left(i-1, m-i, n-i; \frac{1-I_d}{1+I_d}, \frac{I_d}{1+I_d}, \frac{I_d}{1+I_d} \right) \quad (2.3)$$

$$P_{1,1}^{(d)} = \frac{1}{1+I_d}, \quad (2.4)$$

Figura 2.1: Processo de Poisson em duas dimensões. Existem i pontos na intersecção das superfícies V_2 (branco), na crescente A (amarelo) existem $n - 1 - i$ pontos e na crescente B (azul) existem $m - 1 - i$ pontos.

onde $P_{1,1}^{(d)}$ é a densidade de casais (vizinhos mutuamente mais próximos), e as ordens de vizinhança $m = 1, 2, \dots, \infty$, $n = 1, 2, \dots, \infty$, $\text{Mult}(n_a, n_b, n_c; \pi_a, \pi_b, \pi_c)$ é a distribuição multinomial dada por:

$$\text{Mult}(n_a, n_b, n_c; \pi_a, \pi_b, \pi_c) = (n_a + n_b + n_c)! \frac{\pi_a^{n_a} \pi_b^{n_b} \pi_c^{n_c}}{(n_a! n_b! n_c!)}, \quad (2.5)$$

e, finalmente,

$$I_d = I_{1/4} \left(\frac{1}{2}, \frac{d+1}{2} \right) = \int_0^{1/4} dt \frac{t^{-1/2} (1-t)^{(d+1)/2-1}}{B\left(\frac{1}{2}, \frac{d+1}{2}\right)}, \quad (2.6)$$

onde $I_z(a, b)$, com $\text{Re}(a) > 0$ e $\text{Re}(b) > 0$, é a *função beta incompleta normalizada* [16] e $B(a, b) = 2 \int_0^1 dt t^{a-1} (1-t)^{b-1}$ é a função beta. Geometricamente, I_d representa o volume relativo da crescente comparado ao volume da hipersfera num processo de Poisson, como mostrado na Fig. 2.1 para $d = 2$ [15], na qual temos duas crescentes (amarelo e azul). Note que a dimensionalidade d do RPP somente aparece de maneira indireta, através de I_d .

Em uma dimensão, $P_{1,1}^{(1)} = 2/3$, ou seja, dois terços de um meio unidimensional gerado por um processo espacial de Poisson compreende pares de vizinhos mutuamente mais próximos. A determinação desta probabilidade para casos em que meios desordenados foram gerados por um processo espacial de Poisson é importante para estudos da dinâmica estocástica do turista, como veremos no Cap. 3. Outro aspecto importante para a Caminhada do Turista é a estatística de ordem sobre o meio da caminhada, ou seja, a estatística de classificação de vizinhanças. Esta estatística para meios unidimensionais gerados por um processo de Poisson está bem detalhada na Sec. 2.2.

2.1.2 Grafo do turista

Consideremos agora, um caminhante que se move sobre os sítios do meio desordenado apresentado previamente, seguindo uma regra determinista de, a cada intervalo de tempo, ir para o sítio mais próximo que não tenha sido visitado nos μ intervalos anteriores. Dessa forma, um caminhante executa um passeio parcialmente auto-repulsivo, onde esta auto-repulsão é limitada pela janela de memória μ . Com esta regra, o comportamento do caminhante depende estritamente do conjunto de dados da configuração do meio e seus movimentos são inteiramente realizados com base numa *tabela de vizinhança*.

Essa tabela de vizinhança pode ser vista como uma matriz $N \times \mu$ que contém todos os N sítios do meio nas linhas e a classificação de seus μ vizinhos mais próximos nas colunas, como mostra a Tab. 2.1. Se imaginarmos os sítios como nodos, a relação de vizinhança como ligações entre sítios e que a ordem de vizinhança pondera as ligações, então esta tabela de vizinhança representa o *Grafo do Turista*. A Fig. 2.2 mostra uma ilustração deste grafo.

Tabela 2.1: Tabela de vizinhança: os vizinhos de cada sítio estão ordenados dos mais próximos aos mais distantes até o μ -ésimo vizinho.

1	1ºvizinho	2ºvizinho	...	μ -ésimo vizinho
2	1ºvizinho	2ºvizinho	...	μ -ésimo vizinho
$\vdots$	1ºvizinho	2ºvizinho	...	μ -ésimo vizinho
N	1ºvizinho	2ºvizinho	...	μ -ésimo vizinho

Podemos dizer que o grafo do turista é compreendido por nodos com $\mu + 1$ ligações direcionadas para fora (μ vizinhos e uma ligação ao próprio sítio), ponderadas pela distância entre sítios, e com um número variável de ligações direcionadas para cada nodo, visto que alguns sítios podem estar classificados como vizinhos próximos de vários outros sítios. Note que ponderar as ligações através das distâncias entre sítios é simplesmente uma maneira de ordenar suas vizinhanças.

Embora este grafo apresente apenas um tipo de nodo, devido à regra determinista que gera a tabela de vizinhança, a distribuição de ligações direcionadas para fora (k_{out}) é diferente da distribuição de ligações direcionadas para cada nodo (k_{in}). A distribuição de k_{out} é dada pela função delta de Dirac, como mostra a Eq. (2.7), e resultados numéricos mostram que a distribuição de k_{in} é binomial, como mostra a Eq. (2.8).

$$P(k_{out}) = \delta(k_{out}, \mu + 1) = \mu + 1 ; \quad (2.7)$$

$$P(k_{in}; n, p) = \frac{n!}{k_{in}!(n - k_{in})!} p^{k_{in}} (1 - p)^{n - k_{in}} . \quad (2.8)$$

Figura 2.2: Grafo gerado a partir da tabela de vizinhança dado um meio desordenado com $N = 20$ sítios e $\mu = 3$. As ligações se sobrepõem e os números em cada ligação indicam o peso da ligação (ou ordem de vizinhança).

Visto que o número total de ligações k_{in} e k_{out} são iguais, temos o valor esperado:

$$E(k_{in}) = E(k_{out}) = \mu + 1 . \quad (2.9)$$

As propriedades desses grafos e representação, por estes, da caminhada do turista, permitiram que Rissau et.al. [8] obtivesse resultados da caminhada estocástica com memória $\mu = 1$ em sistemas unidimensionais.

2.2 Distribuição espacial de Poisson e Estatística de Vizinhança

Aqui descrevemos o processo de distribuição de sítios em sistemas unidimensionais e detalhamos a estatística de k -ésimos vizinhos desta distribuição. Os resultados desta distribuição em sistemas unidimensionais podem ser generalizados para dimensões arbitrárias.

2.2.1 Distribuição dos Sítios: Distribuição de Poisson

Para caracterizar uma distribuição de pontos, a maioria dos livros textos [17, 18] apresentam abordagens relacionadas aos processos de eventos que ocorrem no tempo. Embora, processos espaciais devam apresentar as mesmas propriedades de processos temporais para caracterizar o mesmo processo de distribuição de eventos, considerar o tempo ou o espaço altera resultados importantes. Isso se deve ao fato de:

1. o tempo apresentar um sentido específico (flecha do tempo), enquanto que o espaço unidimensional apresenta ao menos dois sentidos, por exemplo, deve-se considerar as direções direta $\rightarrow$ esquerda e esquerda $\rightarrow$ direita.
2. os processos no espaço podem ocorrer em diferentes dimensões, inclusive em limites de alta dimensionalidade, nos chamados modelos de campo médio.

Para nosso interesse, os resultados para distribuições de vizinhos de pontos distribuídos no espaço unidimensional são relevantes. Sendo assim, vamos abordar processos de eventos espaciais que ocorrem em sistemas unidimensionais.

Considere sítios distribuídos no espaço, por exemplo, flores de determinada cor idealizadas como pontos num jardim, ou cidades vistas como pontos em uma área geográfica [19]. Em uma dimensão, podemos idealizar carros numa rodovia, em certo instante de tempo, como pontos numa reta, observe a Fig. 2.3.

Figura 2.3: Num meio infinito (semi-reta), os pontos são posicionados nas coordenadas x_i e as distâncias Δx_i são dadas pela diferença entre as coordenadas de pontos consecutivos.

Neste caso, podemos dizer que a distribuição de pontos ocorre com uma densidade de N pontos por unidade de comprimento. Agora, além de considerar que esta rodovia (reta) é infinita, se este instante foi escolhido de forma aleatória e cada carro representa um ponto independente então a distribuição de carros (pontos) caracteriza um processo de Poisson se apresentar as propriedades:

- (i) apenas um ponto ocupa dada posição x_i ,
- (ii) a distribuição de pontos é independente e

- (iii) a probabilidade de posicionar um ponto em cada intervalo x_i e $x_i + \delta x_i$ é constante ao longo de toda extensão da reta.

A partir destas considerações, este processo de distribuição de pontos apresenta as propriedades:

1. num intervalo de tamanho L , os z pontos nas posições $x_i, i = 1, 2, \dots, z$ se ajustam a uma distribuição de Poisson $(LN)^z e^{-LN} / z!$, com número de pontos médio LN e
2. a distribuição de distâncias Δx_i entre pontos consecutivos é dada por uma distribuição exponencial com densidade N .

Para demonstrar esta afirmação, observe a Fig. 2.4 e considere o subintervalo de x_1 até $x_1 + \delta x$, sendo δx uma variável contínua ao longo da reta. Como neste caso, o processo

Figura 2.4: Sítios posicionados em $x_i, i = 1, 2, 3$ e 4 , por um processo de Poisson e as distâncias Δx_i obtidas por $x_i - x_{i-1}$. Esta semi-reta representa um meio infinito, a variável δx é contínua em todo este meio e apresenta a direção indicada pela seta.

de Poisson ocorre com uma densidade $N\delta x$, a probabilidade de que nenhum (zero) outro ponto seja posicionado dentro do dado subintervalo é $e^{-N\delta x} (N\delta x)^0 / 0! = e^{-N\delta x}$. Seja a variável contínua Δx que descreve a distância entre pontos consecutivos. Note que não terá nenhum ponto dentro do subintervalo $(x_1, x_1 + \delta x)$ somente se $\Delta x > \delta x$. Então, $P(\Delta x > \delta x) = e^{-N\delta x}$, ou no caso complementar, $P(\Delta x \leq \delta x) = 1 - P(\Delta x > \delta x) = 1 - e^{-N\delta x} = F_N(\delta x)$. Sendo que $F_N(\delta x)$ é a função acumulada de $f_N(\delta x)$, que representa a PDF de Δx , então, deve ser verdade que $f_N(\delta x) = d(1 - e^{-N\delta x}) / d\delta x = N e^{-N\delta x}$. Sendo N a taxa de pontos por unidade de comprimento, então a separação média entre dois pontos consecutivos é $\ell = 1/N$. Assim, fazendo uma mudança de variável, podemos reescrever a PDF de distâncias Δx_i , entre pontos consecutivos, em função da separação média dos pontos num meio desordenado unidimensional:

$$f_\ell(\delta x) = \frac{e^{-\delta x/\ell}}{\ell}, \quad \delta x > 0. \quad (2.10)$$

Para validar numericamente a distribuição de distâncias Δx , distribuímos de forma uniforme e independente $N = 2 \times 10^4$ pontos num segmento unitário de reta. Como $N \gg 1$, podemos assumir que este processo representa aproximadamente um processo de Poisson. Em seguida, todas as distâncias entre sítios consecutivos foram calculadas. A distribuição destas distâncias pode ser observada na Fig. 2.5.

Figura 2.5: Distribuição de distância entre pontos consecutivos. Estes pontos foram gerados por um processo de Poisson com parâmetro $\ell = 5.10^{-5}$. A linha contínua representa a Eq. (2.10).

Podemos assumir que existe equivalência entre a distribuição exponencial das distâncias (distribuição num meio infinito) e os resultados de simulação do segmento unitário de reta (meio finito). Esta equivalência não é trivial [5], pois os resultados obtidos para o meio infinito assumem que as distâncias entre sítios consecutivos são variáveis i.i.d. (independentes e identicamente distribuídas) e seguem uma distribuição exponencial, assumindo, em princípio, qualquer valor no intervalo $[0; \infty)$, o que obviamente não é verdade para o meio finito. No entanto, tal equivalência entre estes dois meios pode ser demonstrada [5]. A posição x_i do ponto i no meio infinito segue uma distribuição de Poisson. Se o meio infinito for restrito ao comprimento das primeiras $N + 1$ distâncias e normalizado para se ajustar ao intervalo $[0; 1]$ (meio finito), então a posição do ponto i também terá distribuição de Poisson, como num autêntico meio infinito.

Prosseguimos descrevendo as distribuições de vizinhos mais próximos de pontos distribuídos por um processo de Poisson.

2.2.2 Distribuição de Distâncias de Primeiros Vizinhos

Selecionamos de forma arbitrária uma sequência de pontos como ilustra a Fig. 2.6. Podemos estabelecer a PDF da distância $\Delta x^{(1)}$ entre um ponto x_i e seu primeiro vizinho (vizinho mais próximo), se considerarmos as duas direções que partem do ponto de interesse x_i . Para isso, consideramos o comprimento definido pelo intervalo $(x_i - \delta_1, x_i + \delta_1)$, que simplesmente é dado por $2\delta_1$, sendo δ_1 uma variável aleatória contínua. Desta forma, $\Delta x^{(1)}$ será maior que δ_1 se, e somente se, o intervalo $(x_i - \delta_1, x_i + \delta_1)$ não contiver nenhum outro sítio, exceto o sítio x_i . A probabilidade de não haver nenhum ponto dentro do intervalo $2\delta_1$ é dada pela distri-

Figura 2.6: Nesta sequência, o ponto de interesse é x_i . Veja que seu primeiro vizinho é x_{i-1} e se encontra na posição $x_i - \Delta x^{(1)}$. Para encontramos a PDF das distâncias $\Delta x^{(1)}$ usamos uma variável contínua $\pm \delta_1$, centrada em x_i .

buição de Poisson com parâmetro $2\delta_1/\ell$, $e^{-2\delta_1/\ell}(2\delta_1/\ell)^0/0! = e^{-2\delta_1/\ell}$. Esta probabilidade é igual à probabilidade de $P(\Delta x^{(1)} > \delta_1)$. Sendo assim, podemos encontrar a função acumulada da distribuição de $\Delta x^{(1)}$ se escrevermos $P(\Delta x^{(1)} \leq \delta_1) = 1 - P(\Delta x^{(1)} > \delta_1) = F_\ell^{(1)}(\delta_1)$. Agora, derivando em relação a δ_1 , encontramos:

$$f_\ell^{(1)}(\delta_1) = \frac{e^{-\delta_1/(\ell/2)}}{\ell/2}, \quad (2.11)$$

com $\delta_1 > 0$.

A expressão (2.11) é a PDF que descreve a distância entre um ponto e seu primeiro vizinho. Prosseguimos usando o mesmo raciocínio para encontrar a PDF que descreve $\Delta x^{(2)}$, a distância entre um ponto e seu segundo vizinho mais próximo.

2.2.3 Distribuição de Distâncias de Segundos Vizinhos

Novamente selecionamos de forma arbitrária uma sequência de pontos como mostra a Fig. 2.7. Usando o mesmo raciocínio anterior, devemos considerar as duas direções que partem do ponto de interesse x_i . Mas agora, o comprimento é dado por $2\delta_2$ e está definido pelo intervalo $(x_i - \delta_2, x_i + \delta_2)$. Desta forma, $\Delta x^{(2)}$, distância de x_i ao seu segundo vizinho mais próximo, será maior que δ_2 se, e somente se, o dado intervalo contiver o ponto x_i e apenas o primeiro vizinho. A probabilidade de haver apenas um ponto, além do ponto x_i , dentro do intervalo $2\delta_2$ é

Figura 2.7: Como na Fig. 2.6, nesta sequência, o ponto de interesse é x_i . Aqui, o primeiro vizinho é x_{i-1} e se encontra na posição $x_i - \Delta x^{(1)}$, e o segundo vizinho é x_{i+1} na posição $x_i + \Delta x^{(2)}$. Para encontramos a PDF das distâncias $\Delta x^{(2)}$ (distância ao segundo vizinho) usamos uma variável contínua $\pm \delta_2$, também centrada em x_i .

calculada pela soma das probabilidades de haver apenas um ponto e de não haver ponto nenhum dentro do intervalo: $e^{-2\delta_2/\ell}(2\delta_2/\ell)^1/1! + e^{-2\delta_2/\ell}(2\delta_2/\ell)^0/0! = e^{-2\delta_2/\ell}(2\delta_2/\ell)^1 + e^{-2\delta_2/\ell}$.

Esta probabilidade é igual à probabilidade de $P(\Delta x^{(2)} > \delta_2)$. Encontramos a função acumulada, escrevendo $P(\Delta x^{(2)} \leq \delta_2) = 1 - P(\Delta x^{(2)} > \delta_2) = F_\ell^{(2)}(\delta_2)$. Derivando em relação à δ_2 , encontramos:

$$f_\ell^{(2)}(\delta_2) = \frac{\delta_2 e^{-\delta_2/(\ell/2)}}{(\ell/2)^2} \quad (2.12)$$

com $\delta_2 > 0$, que é a PDF que descreve a distância entre um ponto a seu segundo vizinho mais próximo. A seguir, generalizamos a Eq. (2.12) para determinar a PDF de distâncias de k -ésimos vizinhos mais próximos de sítios distribuídos por um processo de Poisson.

2.2.4 Distribuição de Distâncias de k -ésimos Vizinhos

Com o mesmo raciocínio usado para encontrar a PDF de distâncias de primeiros e segundos vizinhos, encontramos a PDF de k -ésimos vizinhos mais próximos de um ponto de interesse. Observe o desenho da Fig. 2.7 e considere o sítio de interesse x_i . Considere a variável aleatória $\Delta x^{(k)}$ que descreve a distância entre o sítio x_i e seu k -ésimo vizinho mais próximo. Dessa forma, $\Delta x^{(k)}$ é maior que δ_k se, e somente se, o comprimento $2\delta_k$ delimitado pelo intervalo $(x_i - \delta_k, x_i + \delta_k)$ contiver até $k-1$ sítios, exceto o sítio de interesse. Detalhadamente escrevemos a função densidade acumulada $F_\ell^{(k)}(\delta_k)$ em função das probabilidades:

$$\begin{aligned} F_\ell^{(k)}(\delta_k) &= P(\Delta X^{(k)} \leq \delta_k) = 1 - P(\Delta X^{(k)} > \delta_k) \\ &= 1 - P(\text{até } k-1 \text{ sítios dentro do comprimento } 2\delta_k) \\ &= 1 - \sum_{z=0}^{k-1} e^{-2\delta_k/\ell} \frac{(2\delta_k/\ell)^z}{z!} \end{aligned}$$

Agora, novamente usando a relação $f_\ell^{(k)}(\delta_k) = d(F_\ell^{(k)}(\delta_k))/d\delta_k$, encontramos:

$$\begin{aligned} f_\ell^{(k)}(\delta_k) &= \frac{d}{d\delta_k} \left[1 - \sum_{z=0}^{k-1} e^{-2\delta_k/\ell} \frac{(2\delta_k/\ell)^z}{z!} \right] \\ &= \sum_{z=0}^{k-1} \frac{2}{\ell} e^{-2\delta_k/\ell} \frac{(2\delta_k/\ell)^z}{z!} - \sum_{z=1}^{k-1} \frac{2}{\ell} e^{-2\delta_k/\ell} \frac{(2\delta_k/\ell)^{z-1}}{(z-1)!} \\ &= \sum_{z=0}^{k-1} \frac{2}{\ell} e^{-2\delta_k/\ell} \frac{(2\delta_k/\ell)^z}{z!} - \sum_{z=0}^{k-2} \frac{2}{\ell} e^{-2\delta_k/\ell} \frac{(2\delta_k/\ell)^z}{(z)!} \\ &= \left(\frac{1}{\ell/2} \right)^k \frac{(\delta_k)^{k-1}}{\Gamma(k)} e^{-[\delta_k/(\ell/2)]}, \delta_k > 0 \end{aligned} \quad (2.13)$$

sendo $\Gamma(k) = (k-1)!$ a função gamma. Observe que para $k = 1$ e $k = 2$, as PDF (2.11) e (2.12) são respectivamente reencontradas. A distância entre vizinhos de ordem $k \geq 1$ segue uma distribuição gamma com parâmetros k e $\ell/2$. No caso particular $k = 1$, a distribuição gamma se resume a uma distribuição exponencial. A média e a variância da Eq. (2.13) são:

$$\overline{f_\ell^{(k)}} = k \frac{\ell}{2}, \quad (2.14)$$

$$\sigma^2 = k \left(\frac{\ell}{2} \right)^2, \quad (2.15)$$

de modo que,

$$\frac{\sigma}{\overline{f_\ell^{(k)}}} = \frac{\sqrt{k}(\ell/2)}{k(\ell/2)} = \frac{1}{\sqrt{k}}. \quad (2.16)$$

Na Fig. 2.8 mostramos resultados para $k = 1, 2, 3, 4, 5$ obtidos a partir de uma simulação de $N = 10^4$ pontos distribuídos por um processo de Poisson num segmento unitário de reta. As linhas contínuas são dadas pela Eq. (2.13).

Figura 2.8: PDF de k -ésimos vizinhos para $k = 1, 2, 3, 4, 5$. Os símbolos representam resultados de simulação com $N = 10^4$ e as linhas foram obtidas a partir da Eq. (2.13).

A distância entre vizinhos de k -ésima ordem para um meio desordenado com arbitrária dimensionalidade d , gerado por um processo de Poisson, foi calculada por César A. S. Terçariol e reproduzimos, aqui, a fim de mostrar uma generalização da expressão da Eq. (2.13).

$$f_{\ell}^{(k,d)}(\delta_k) = \frac{d}{\ell \Gamma(k)} \exp \left[-2 \frac{\delta_k \pi^{d/2} \ell^d}{d \Gamma(d/2)} \right] (\delta_k)^k \left[\frac{\pi^{d/2} \ell^d}{\Gamma(d/2 + 1)} \right]^k. \quad (2.17)$$

Retornando à função acumulada da Eq. (2.13), a probabilidade acumulada de se encontrar um valor de $\delta_k < \delta$ é dada por:

$$F_{\ell}^{(k)}(\delta) = \int_0^{\delta} d\delta_k f_{\ell}^{(k)}(\delta_k) = 1 - \frac{\Gamma(k, 2\delta/\ell)}{\Gamma(k)}, \quad (2.18)$$

onde a função $\Gamma(a, b) = \int_b^{\infty} dt \, t^{a-1} e^{-t}$ é a função gamma incompleta (complementar e não normalizada). Podemos também calcular a função característica da Eq. (2.13).

$$\tilde{f}_{\ell}^{(k)}(\tilde{\delta}) = \int_{-\infty}^{\infty} d\delta e^{i\tilde{\delta}\delta} f_{\ell}^{(k)}(\delta) = \left(1 - i \frac{2\tilde{\delta}}{e} \right)^{-k}. \quad (2.19)$$

A descrição destas funções probabilidade acumulada e característica é extremamente importante para prosseguirmos no cálculo das probabilidades de uma trajetória, sem revisita, da caminha do turista, como mostramos no Cap. 7.

2.3 Caminhada Determinista do Turista

Nesta seção fazemos uma breve revisão da Caminhada Determinista do Turista (CDT) [3, 4]. Considere o meio desordenado descrito na seção 2.1. Um caminhante pode se mover sobre os sítios deste meio seguindo a regra determinista de ir para o sítio mais próximo que não tenha sido visitado nos últimos μ passos anteriores. Desta maneira, obtemos uma caminhada determinista parcialmente auto-repulsiva sobre o meio desordenado. É importante destacar que com esta regra, o caminhante não precisa conhecer mais sítios além dos μ sítios mais próximos (mais o próprio sítio em que se encontra) para tomar decisões na sua movimentação. Como veremos, esta característica é uma grande vantagem na exploração de todo o meio desordenado, visto que apenas informação local é necessária para realizar uma caminhada.

Embora seja uma regra simples, as trajetórias geradas por esta dinâmica não são triviais e apresentam duas partes bem definidas:

1. parte transiente: parte inicial da caminhada composta por t sítios, onde o caminhante passeia pelo meio desordenado explorando (não necessariamente) novos sítios;
2. parte periódica: parte final da caminhada, onde o caminhante é preso em armadilhas, composta por ciclos de período $p \geq \mu + 1$ e novos sítios não são visitados.

O tempo t de transiente e o período p do ciclo dependem da configuração do meio desordenado e do primeiro sítio da caminhada (condição inicial). Podemos destacar que uma caminhada que começa no sítio S_i e termina no sítio S_j não apresenta necessariamente o mesmo comportamento, nem a mesma trajetória, se iniciada a partir do sítio S_j . Com isso, é possível realizar um estudo estatístico das trajetórias geradas por esta regra considerando diferentes condições iniciais e diferentes configurações de meios desordenados. Este problema é difícil de ser tratado e resultados analíticos somente foram obtidos para alguns casos particulares, como $\mu = 1$ [20], no limite de alta dimensionalidade ou $\mu = 2$ [5].

Dentre muitas grandezas que podem ser tratadas, foram consideradas primeiramente a distribuição conjunta de tempos de transiente e períodos de atratores $S_{\mu,d}^{(N)}(t, p)$ [21]. A distribuição de tempos de transiente $S_{\mu,d}^{(N)}(t) = \sum_p S_{\mu,d}^{(N)}(t, p)$ e a distribuição dos períodos p dos atratores $P_{\mu,d}^{(N)}(p) = \sum_t S_{\mu,d}^{(N)}(t, p)$ são distribuições marginais e de interesse especial. Enfatiza-se que para cada configuração de sítios é possível obter estas distribuições.

Para ilustrar a dinâmica apresentada, considere o exemplo de movimentos de aves migratórias em busca de alimentação. Os focos de alimentação são os sítios do meio desordenado, as aves são representadas por caminhantes e o tempo necessário para um foco de alimentação

novamente se tornar atrativo é a memória. Com isso, pode-se fazer a pergunta: as aves conhecem de antemão onde estão os focos de alimentação e já possuem uma trajetória definida, ou elas conhecem apenas informação local para explorar o ambiente em busca de comida e com isso trajetórias não-triviais podem ocorrer? Nosso intuito não é responder esta questão, apenas mostrar como esta regra pode representar situações reais.

Adiante, mostramos resultados estatísticos da dinâmica da CDT e do comportamento da caminhada quando dois parâmetros são combinados: a memória μ do caminhante e a dimensionalidade finita d do meio. Resultados da CDT no limite de alta dimensionalidade podem ser encontrados na referência [5].

2.3.1 Turista preguiçoso

O caso mais simples de lidar com a CDT é considerar a memória nula, $\mu = 0$. A cada passo, todos os sítios são permitidos, assim o caminhante salta para o sítio mais próximo, ou seja, neste caso o caminhante permanece no mesmo sítio e assim a trajetória tem comprimento de transiente nulo e um ciclo de período $p = 1$. Dessa forma, a distribuição conjunta do tempo de transiente e período de ciclo é dada simplesmente por:

$$S_{0,d}^{(N)}(t, p) = \delta_{t,0} \delta_{p,1} , \quad (2.20)$$

onde $\delta_{i,j}$ é o delta de Kronecker. Apesar desta trivialidade, este caso se torna interessante na versão estocástica da CT [8], como mostramos na seção 2.4.

2.3.2 Turista sem memória

Para memória $\mu = 1$, o caminhante não pode permanecer no sítio em que se encontra e conhece apenas seu vizinho mais próximo. Assim, a cada intervalo de tempo, ele precisa deixar o sítio atual e ir para o mais próximo. O nome “turista sem memória” é devido ao fato de que o caminhante lembra-se apenas do sítio em que está, mas não se lembra de nenhum sítio anteriormente visitado. Esta regra não favorece uma exploração de todo o meio aleatório, porque depois de um curto transiente de tempo, o caminhante é aprisionado por um casal de sítios mutuamente mais próximos. Os casais são os atratores deste meio desordenado, e a distribuição do período p é simplesmente $S_{1,d}^{(N)}(p) = \sum_t S_{1,d}^{(N)}(t, p) = \delta_{p,2}$. A distribuição conjunta do tempo de transiente e do período do ciclo foi analiticamente obtida para $N \gg 1$ por Terçariol e Martinez [20]:

$$S_{1,d}^{(\infty)}(t, p) = \frac{\Gamma(1 + I_d^{-1})(t + I_d^{-1})}{\Gamma(t + p + I_d^{-1})} \delta_{p,2} , \quad (2.21)$$

onde $\Gamma(z) = \int_0^\infty dt t^{z-1} e^{-t}$ é a função gamma e I_d é dado pela expressão 2.6.

2.3.3 Turista com memória em sistemas unidimensionais

Fenômenos interessantes ocorrem quando valores de memória $\mu > 1$ são considerados. Nestes casos, embora a distribuição de ciclos apresente um pico em $p_{min} = \mu + 1$, ela também apresenta todo um espectro de possíveis períodos $p \neq p_{min}$, com uma cauda cuja forma aparentemente segue uma lei de potência [3, 4, 6, 5, 22, 23, 24].

Para nossos estudos, é interessante destacar os resultados obtidos para sistemas unidimensionais que revelam sérias restrições na dinâmica da caminhada. Para memórias curtas ($\mu \ll N$), ciclos de período $p \in [2\mu + 1, 2\mu + 3]$ são proibidos. Além disso, para $\mu = 2$ todos os períodos ímpares exceto $p_{min} = 3$ são proibidos. Com estas restrições, o número médio de sítios por atrator é [3]:

$$n(p) = \frac{p}{2} + \mu. \quad (2.22)$$

No entanto, a cauda aparentemente em forma de lei de potência da distribuição marginal dos períodos $S_{\mu,d}^{(N)}(p)$ permite que o caminhante explore todo o meio desordenado mesmo que a memória tenha valores pequenos ($\mu \ll N$).

Se um caminhante iniciar a caminhada numa extremidade de um mapa unidimensional, ele pode alcançar a outra extremidade (considerando condições abertas de contorno) se ele andar N passos sem mudar a direção da caminhada. Sendo assim, ele precisa de uma memória μ grande o suficiente para evitar ser aprisionado em ciclos. Para estudar este fenômeno, considere a probabilidade de atravessar o meio desordenado. Para cada memória, esta probabilidade foi calculada por Terçariol et. al. [23, 25]:

$$P(N|\mu) = (1 - 2^{-\mu})^{N-\mu-1}. \quad (2.23)$$

A Fig. 2.9 mostra graficamente a Eq. (2.23) para seis valores de N . Podemos, então, facilmente notar que, numa pequena faixa de memória, ocorre uma abrupta mudança no comportamento exploratório do caminhante. Considerando $N \gg \mu + 1$ e calculando o ponto de inflexão de (2.23), pode-se determinar o valor de memória na qual esta mudança de comportamento ocorre:

$$\mu_1 = \log_2 N. \quad (2.24)$$

Já, a largura desta faixa de memória é independente de N e vale $\epsilon = e/\ln 2$. Os detalhes deste cálculo são encontrados na referência [6, 5, 23].

Agora, observamos que, para $\mu < \mu_1$, o caminhante é aprisionado em ciclos dentro do meio desordenado e, desta forma, não consegue alcançar a outra extremidade do meio e sua exploração é dita localizada. Por outro lado, se $\mu > \mu_1$, o número de sítios visitados aumenta, permitindo que o caminhante alcance a outra extremidade do meio e torna, assim, sua exploração global (estendida). Com isso, podemos dizer que esta dinâmica apresenta uma transição entre os regimes localizado e estendido de exploração de sistemas unidimensionais. Além disso, esta transição ocorre numa determinada memória crítica μ_1 , muito menor que o tamanho do meio desordenado, dada pela Eq. (2.24).

Figura 2.9: Representação gráfica da Eq. (2.23) para $N = 2^{10}, 2^{12}, 2^{14}, 2^{16}, 2^{18}$ e 2^{20} . É possível notar que numa largura de memória $\varepsilon = e/\ln 2$ ocorre uma abrupta mudança no comportamento das curvas quando $\mu_1 = \log_2 N = 10, 12, 14, 16, 18$ e 20 .

Por estes resultados, conclui-se que com baixa memória, ou seja, apenas com informação local, é possível garantir uma boa exploração de todo o meio desordenado. Dessa forma, a implementação deste algoritmo tem a vantagem de explorar o meio desordenado com baixo custo computacional, visto que não é necessário armazenar informação de todo o ambiente. Apenas a tabela de vizinhança deve ser mantida na memória RAM do computador.

Agora, se pensarmos em algoritmos computacionais, como o *recozimento simulado*, como este algoritmo da CDT se comportaria com a inclusão de um parâmetro estocástico? Como a variação da temperatura alteraria a memória crítica na exploração do meio desordenado? A partir de questões como estas surgiu a versão estocástica da caminhada do turista, que apresentamos a seguir.

2.4 Caminhada Estocástica do Turista

A Caminhada Estocástica do Turista (CET) é uma generalização da Caminhada Determinista do Turista (CDT) [3], para abranger situações mais realistas, como por exemplo, o forrageamento (busca de focos de alimentação por animais). Neste caso, para mover sobre o meio desordenado definido na seção 2.1, a estratégia do caminhante é baseada em uma função custo $E(D_{j,i})$ e segue uma função densidade de probabilidade (PDF, do inglês “probability density function”), que depende do inverso da temperatura formal, $T > 0$, e da memória do caminhante $\mu \geq 0$. A temperatura formal pode ser entendida como a distância característica que um caminhante salta. O inverso desta temperatura T é o parâmetro estocástico $\beta = 1/T$ e à medida que β decresce, longos saltos são favorecidos. A memória gera uma janela auto-repulsiva com os últimos μ sítios visitados, que são proibidos de revisitação nos próximos μ passos da caminhada. Vamos considerar a probabilidade de salto a partir do sítio S_i para o sítio S_j como:

$$P_{j,i}^{(\beta,\mu)} = \frac{e^{-\beta E(D_{j,i})}}{Z_i^{(\beta,\mu)}}, \quad (2.25)$$

que é uma forma geral a um único parâmetro, pois E é uma função arbitrária e,

$$Z_i^{(\beta,\mu)} = \sum_{k=1}^N ' e^{-\beta E(D_{k,i})} \quad (2.26)$$

é chamado de coeficiente de normalização, onde enfatizamos que a soma $\sum'$ exclui os sítios proibidos pela janela de memória μ . Com a restrição no somatório, quando $\mu > 0$, o coeficiente $Z_i^{(\beta,\mu)}$ é diferente de $Z_j^{(\beta,\mu)}$, assim também, a probabilidade $P_{j,i}^{(\beta,\mu)}$ é diferente de $P_{i,j}^{(\beta,\mu)}$.

Considerando a função custo $E(D)$ como uma função monótona crescente, a probabilidade (2.25) privilegia exploração local quando $T \rightarrow 0$ ($\beta \rightarrow \infty$) e no limite $T = 0$ a CDT é re-encontrada, o que eventualmente implica em pouco exploração do meio desordenado. Quando $T \rightarrow \infty$ ($\beta \rightarrow 0$), pode-se assumir que $e^{-\beta E(D)} \approx 1$ e o caminhante pode visitar todos os sítios permitidos com a mesma probabilidade $P_{j,i}^{(\beta,\mu)} = 1/(N - \mu)$, para qualquer sítio permitido j , aumentando a exploração de todo o meio. Graficamente, podemos visualizar como a temperatura privilegia exploração local ou estendida pela Fig. 2.10. Considerando que o caminhante se encontra no sítio vermelho, a área azul representa sua probabilidade de transição para os sítios em amarelo (a restrição dada pela memória do caminhante não está representada neste esquema). À medida que aumentamos a temperatura (da esquerda para a direita), maior área é privilegiada para a movimentação do caminhante, permitindo uma exploração estendida.

Observe que no regime de alta temperatura reencontramos a simetria entre as probabilidades

Figura 2.10: Representação gráfica da influência da temperatura na exploração do meio desordenado. Um caminhante no sítio vermelho tem sua probabilidade de transição para os sítios em amarelo (a restrição dada pela memória do caminhante não está neste esquema) representada pela área azul. À medida que aumentamos a temperatura, região maior (área azul) é privilegiada e longos saltos são permitidos.

$P_{j,i}^{(\beta,0)} = P_{i,j}^{(\beta,0)}$ (caso simétrico para $\mu = 0$). Assim, podemos nos perguntar em qual temperatura T e memória μ pode-se esperar que a transição entre as explorações localizada e estendida ocorra?

A seguir mostramos uma revisão da CET [26] e os resultados que mostram que uma transição do tipo vítrea ocorre numa dada temperatura crítica T_d para uma específica função custo num meio com dimensionalidade d arbitrária e $\mu = 0$ (turista preguiçoso). Também, as dificuldades nos cálculos analíticos em sistemas unidimensionais, para caminhantes com memória $\mu = 1$, são apresentadas.

2.4.1 Turista preguiçoso em sistemas com dimensionalidade arbitrária

Martinez et. al. [7] analisaram caminhantes estocásticos com memória $\mu = 0$ se movendo em meios desordenados de d -dimensões. Este estudo focalizou na conexão entre dois campos aparentemente distintos: modelos de comportamento exploratório [27, 28] e física estatística de transições vítreas, descritas pelo modelo “Trap Model” de Bouchaud [10, 29, 30, 31, 32, 33]. Eles mostraram que a transição vítrea pode aparecer quando um caminhante explora um meio desordenado com recursos (por exemplo focos de alimentação) localizados. Esta exploração depende da maneira em que é definida a função custo $E(D_{j,i})$, usada para ponderar os possíveis movimentos.

Para cada dimensão d dos meios desordenados estudados, existe uma função custo específica que permite uma transição vítrea entre os comportamentos localizados e estendidos. O parâmetro de ordem, neste caso, é o tempo médio de residência nos sítios $\langle t_r(\beta) \rangle$, isto é, o

tempo médio que o caminhante fica “preso” num dado sítio. Embora qualquer sítio apresente um tempo de aprisionamento finito, o tempo médio de residência $\langle t_r \rangle$ diverge abaixo de um nível finito de estocasticidade T_d . Neste caso, o sistema entra num regime fora de equilíbrio e o fenômeno de envelhecimento aparece, como no “Trap Model”.

Para calcular $\langle t_r(\beta) \rangle$, considere a probabilidade, em um dado instante de tempo, de um caminhante permanecer num dado sítio a , $p_a(\beta) \equiv P_{a,a}^{(\beta,0)} = 1/Z_a^{(\beta,0)}$ e a probabilidade do caminhante deixar este sítio, $q_a(\beta) = 1 - p_a(\beta)$. É mais conveniente renomear as distâncias de acordo com a ordem de vizinhança em relação ao sítio a , desta maneira, o vizinho mais próximo do sítio a dista $D_a^{(1)}$, o segundo mais próximo dista $D_a^{(2)}$ e por assim por diante. Então, o coeficiente de normalização pode ser escrito como $Z_a^{(\beta,0)} = 1 + \exp \left[-\beta E(D_a^{(1)}) \right] \sum_{j=1}^{N-1} \exp \left[-\beta \Delta_a^{(j)} \right]$, onde $\Delta_a^{(j)} = E(D_a^{(j)}) - E(D_a^{(1)})$.

Dado que em $t = 0$, o caminhante está no sítio a , a probabilidade do caminhante permanecer neste sítio até o tempo t e deixá-lo em $t + 1$ é dado pela distribuição geométrica (o primeiro fracasso após t sucessos): $P_\beta(t) = p_a^t(\beta) q_a(\beta)$. O tempo de residência associado ao sítio a é definido como o tempo esperado:

$$t_r^{(a)}(\beta) = \sum_{t=0}^{\infty} t p_a^t(\beta) q_a(\beta) = \frac{p_a(\beta)}{[1 - p_a(\beta)]} = \exp[\beta E(D_a^{(1)})] \left\{ 1 + \sum_{j=2}^{N-1} \exp \left[-\beta \Delta_a^{(j)} \right] \right\}. \quad (2.27)$$

O tempo médio de residência para uma dada configuração de sítios é $t_r(\beta) = \sum_{a=1}^N t_r^{(a)}(\beta)/N$ e a média sobre a desordem conduz a:

$$\langle t_r(\beta) \rangle = \int dD^{(1)} \dots dD^{(N-1)} P(D^{(1)}, \dots, D^{(N-1)}) \times \frac{t_1(\beta)}{1 + \sum_{j=2}^{N-1} e^{-\beta \Delta^{(j)}}}, \quad (2.28)$$

sendo $t_1(\beta) \equiv e^{\beta E(D^{(1)})}$.

Para calcular $\langle t_r(\beta) \rangle$, deve-se fazer a média sobre toda distribuição de distâncias de vizinhos $P(D^{(1)}, \dots, D^{(N-1)})$. Esta tarefa é realmente difícil, desde que deve-se considerar as bordas do meio desordenado no cálculo. Sendo assim, para remover a dependência com os contornos podemos usar o limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$. Embora, não se possa fatorar a probabilidade conjunta das distâncias ordenadas ($D^{(1)} < D^{(2)} < \dots < D^{(N-1)}$), para continuar o cálculo, pode-se fazer uma aproximação considerando apenas o efeito do tempo de aprisionamento nos saltos para o primeiro vizinho. Aqui, enfatizamos que esta escolha se deve a duas razões:

1. a memória permite saltos para primeiros vizinhos, até mesmo o último visitado; e
2. no limite de baixa temperatura ($\beta \rightarrow \infty$) os movimentos para sítios mais próximos são

extremamente favorecidos.

Assim, $\Delta^{(N-1)} > \dots > \Delta^{(2)} > E(D^{(1)})$ e o termo $\sum_{j=2}^{N-1} e^{-\beta \Delta^{(j)}} \ll 1$ pode ser desprezado na Eq. 2.28 e apenas a PDF da distância para o vizinho mais próximo $P(D^{(1)})$ é relevante, de forma que:

$$\langle t_r(\beta) \rangle \cong \langle t_1(\beta) \rangle = \int_0^\infty dD^{(1)} P(D^{(1)}) e^{\beta E(D^{(1)})}. \quad (2.29)$$

É possível mostrar numericamente que $t_1(\beta)$ diverge com o mesmo expoente e na mesma temperatura que $t_r(\beta)$ [7]. Para um processo espacial de Poisson, a PDF da distância do primeiro vizinho é simplesmente $P(D^{(1)}) = S_d(D^{(1)}) e^{-V_d(D^{(1)})}$, onde chamamos a atenção a fato de que $V_d(R) = A_d R^d$ é o volume de uma hipersfera de raio R e $S_d(R) = A_d d R^{d-1}$ é sua superfície. O fator geométrico $A_d = \pi^{d/2} / \Gamma(d/2 + 1)$ é o volume de uma hipersfera de raio unitário e $\Gamma(z)$ é a função gamma. Assim,

$$\langle t_1(\beta) \rangle = A_d d \int_0^\infty dD^{(1)} D^{(1)^{d-1}} e^{\beta E(D^{(1)}) - A_d D^{(1)^d}}. \quad (2.30)$$

Focamos, agora, nossa discussão na função custo $E(D)$. Se considerarmos D sendo uma distância euclidiana, então deve-se esperar que $E(D)$ seja uma função monótona crescente de D , pois quanto maior for a distância, maior será o custo para percorrer toda a trajetória. Existem diferentes maneiras para que uma função seja uma função monótona crescente de seu argumento, por exemplo uma função que segue lei de potência ou uma exponencial, ou uma função generalizada que inclui esta situação [34]. Nestes casos, a função cresce indefinidamente, todavia, existem situações nas quais a função cresce mas apresenta um ponto de inflexão que muda a concavidade da curva, assim a função cresce até atingir um valor máximo. Exemplo desta situação é uma função acumulada (da função densidade de probabilidade) na teoria de probabilidade. Outra vez, estas funções podem ser subdivididas em duas categorias, apresentar ou não apresentar um ou mais pontos de inflexão. Como exemplo, podemos citar uma revisão destas funções no contexto de modelos de dinâmica populacional (ou de crescimento) [35].

Para continuar, escolhemos a função custo na forma de lei de potência: $E(D_{j,i}) = D_{j,i}^\alpha$, onde α é um expoente ajustável. Para diferentes valores de α diferentes comportamentos podem ser analisados:

- $\alpha < d$: o $\langle t_1(\beta) \rangle$ é finito para qualquer valor de β , de forma que, para longo período de tempo, o sistema apresenta um processo difusivo.
- $\alpha > d$: o $\langle t_1(\beta) \rangle$ sempre diverge e o sistema apresenta um comportamento subdifusivo e se encontra sempre num regime fora-do-equilíbrio.

- $\alpha = d$: a situação mais interessante aparece, o tempo médio de residência e a “cauda” da distribuição de distâncias de primeiros vizinhos competem e uma transição vítrea aparece em um valor finito de β :

$$\langle t_1(\beta) \rangle = \begin{cases} 1/(1 - \beta/A_d) & (\beta < A_d) \\ \infty & (\beta \geq A_d) \end{cases} \quad (2.31)$$

Neste caso, o tempo médio de residência é finito apenas para $\beta < A_d$ e diverge em $\beta_d = A_d$, ou seja, até β atingir o volume de uma hipersfera de raio unitário em d -dimensões o caminhante pode explorar o meio, depois disso o sistema entra num regime fora do equilíbrio e o fenômeno de envelhecimento emerge.

A PDF do tempo de residência como função de β apresenta uma cauda de lei de potência e uma transição vítrea aparece quando a função custo $E(D_{j,i}) = D_{j,i}^d$ é usada. Todavia, note que estes resultados surgiram a partir de uma distribuição específica de sítios (processo de Poisson) e uma função custo na forma de lei de potência. Mesmo assim, outros cenários podem ser contemplados. Por exemplo, quando correlação é introduzida entre os sítios.

Futuros trabalhos poderiam considerar outras possibilidade de função custo, como as funções generalizadas, que trariam mais riqueza ao espaço de parâmetros. Além de outras formas de montar o cenário desordenado, por exemplo, uma distribuição de sítios que segue uma PDF que tem uma cauda de lei de potência.

Esta revisão revela que uma transição vítrea aparece quando o caminhante não tem memória. A seguir, mostramos o caso em que o caminhante é proibido de permanecer no mesmo sítio ($P_{a,a}^{(\beta,1)} = 0$), isto é, o caminhante tem memória $\mu = 1$.

2.4.2 Turista sem memória em sistemas unidimensionais

Consideremos, agora, que o caminhante tenha memória $\mu = 1$. Assim, a cada intervalo de tempo, o caminhante não pode permanecer no mesmo sítio e salta para um de seus n vizinhos com uma probabilidade de salto que depende da distância $D_{j,i}$ entre os sítios i e j (agora $j \neq i$) de acordo com uma função custo $E(D_{j,i})$. Para examinar esta CET particular, Risau-Gusman et. al. [8] descreveram os meios desordenados em grafos com vizinhança ordenada¹. Assim, todos os N sítios representam N nodos conectados e a probabilidade de salto $P_{a,a}^{(\beta,1)}$ fornece um peso para as ligações entre os nodos i e j . Quando saltos ocorrem neste grafo, a estrutura da rede forma um grafo direcionado. Então, este grafo apresenta dois conjuntos interessantes de

¹Veja a seção 2.1.2 para mais detalhes sobre o grafo do turista.

nodos:

- sumidouro: conjuntos com nodos sem ligações indo para nodos fora do conjunto, e
- fonte: conjuntos com nodos sem ligações vindo de nodos fora do conjunto.

A dinâmica da caminhada mostra que para baixas temperaturas, o caminhante sempre salta para o vizinho mais próximo, e consequentemente é preso num ciclo de período $p = 2$ quando um par de vizinhos mutuamente mais próximos é encontrado. Chamamos este par de vizinhos mutuamente mais próximos de *casal*. Os casais assumem a função de sítios na situação em que o caminhante não tem memória ($\mu = 0$). Se contarmos o tempo a cada dois intervalos, o caminhante parece estar sempre parado. No entanto, para $T > 0$, os casais não são fortemente estáveis e podem ser caracterizados por uma distribuição de tempo de aprisionamento nos casais $P(t_r)$. A partir desta distribuição, pode-se calcular o tempo médio de aprisionamento do caminhante em ciclos de período dois usando a distribuição conjunta de distâncias para um processo espacial de Poisson.

Considere a função custo que permite uma transição vítrea nesta configuração de sítios. Como discutido previamente, uma função custo interessante para sistemas unidimensionais seria uma função linear $E(D_{j,i}) = D_{j,i}$, pois esta função pode originar uma transição entre diferentes regimes de exploração.

Como na seção anterior, ordena-se as distâncias de acordo com os casais. Agora, sejam a e b os sítios do casal, $D_0 = D_{b,a}$ a distância entre eles, e $D_{j,a}(D_{j,b})$ a distância de $a(b)$ até seu $(j + 1)$ - ésimo vizinho mais próximo. Podemos escrever a probabilidade de salto de a para b e *vice versa* usando (2.25): $P_{b,a}^{(\beta,1)} = e^{-\beta D_0} / Z_a^{(\beta,1)}$, $P_{a,b}^{(\beta,1)} = e^{-\beta D_0} / Z_b^{(\beta,1)}$. Note que estas probabilidades em geral são diferentes, pois o salto visto a partir do sítio a é diferente daquele visto a partir do sítio b .

Suponha que, no tempo $t = 0$, o caminhante esteja no sítio a . A probabilidade de que o caminhante permaneça no casal por t passos de tempo e então o deixe é $P_e(t) = (p_a p_b)^{t/2} q_a$, para valores pares de t e $P_o(t) = (p_a p_b)^{(t-1)/2} p_a q_b$ para valores ímpares de t , com $q_a = 1 - p_a$ e $q_b = 1 - p_b$. Desde que a caminhada pode iniciar tanto no sítio a quanto no sítio b , as probabilidades de o caminhante permanecer no casal até o tempo t são $P_e(t)$ e $P_o(t)$. O tempo de residência para este casal é:

$$t_r = \frac{p_a p_b + (p_a + p_b)/2}{1 - p_a p_b} \quad (2.32)$$

Visto que é necessário incluir as bordas nesta expressão a fim de obter o característico comportamento divergente, não é possível obter $\langle t_r(\beta) \rangle$ diretamente através de cálculos analíticos. A estratégia é continuar o cálculo em dois casos extremos, que são fisicamente intuitivos e apresentam esta divergência. No limite de baixa temperatura, podemos usar uma aproximação simétrica, na qual a distância a partir de ambos os membros do casal para seus respectivos segundos vizinhos é muito grande e pode-se assumir que esta distância é igual para ambos os sítios a e b ; assim os coeficientes de normalização são, também, iguais ($Z_a^{(\beta,1)} = Z_b^{(\beta,1)}$). Neste mesmo limite também pode-se usar uma aproximação assimétrica, na qual a distância $D_{1,a}$ é diferente da distância $D_{1,b}$. Supondo que $D_{1,b} \gg D_0$, então o caminhante não pode deixar o casal a partir do sítio b .

A partir destas aproximações, o tempo médio de residência assume valores finitos quando $\beta < \beta_1 = 2$, e diverge quando $\beta = \beta_1 = 2$. No entanto, o sistema apresenta um regime ergódico para altas temperaturas ($\beta < \beta_1$), onde o caminhante pode explorar o meio, e não ergódico para baixas temperaturas, quando $\beta \geq \beta_1$, e o caminhante fica aprisionado em certas regiões do ambiente, prejudicando a exploração do meio. Observe que este comportamento já apareceu para $\mu = 0$.

2.4.3 Comentários

A temperatura crítica obtida para $\mu = 1$ é a mesma para a situação $\mu = 0$. A explicação para este fato foi recentemente descrita por Berbert et. al [26], que observaram que mais de $2/3$ dos N sítios², quando distribuídos por um processo espacial de Poisson, formam casais [22, 20] dessa forma, pode-se desprezar o efeito dos $1/3$ dos N que formam a parte transiente na CDT. Considerando apenas os casais ($2N/3$ sítios) e agora contando o passo de tempo em dois movimentos (renormalização do tempo) obtêm-se a mesma situação quando $\mu = 0$ em passo unitário de tempo, o que explica o fato de ambos os sistemas, $\mu = 0$ e 1 , apresentarem a mesma temperatura crítica. O que torna muito mais difícil lidar com $\mu \geq 2$ na CET é o fato de que no caso determinista, o sistema não apresenta ciclos de períodos característicos, mas um espectro completo [24], que impede a renormalização do tempo como pôde ser feito para o caso $\mu = 1$.

Estes resultados nos conduziu a acreditar que este problema exhibe dois regimes distintos, não ergódico, no qual o caminhante pode ser aprisionado em exploração localizada; e ergódico, quando o caminhante pode explorar todo o meio. Por exemplo, se um caminhante deseja encontrar focos de alimentação ainda não visitados, ele precisa estender sua exploração do ambiente. Conjecturamos que a eficiência deste tipo de exploração é maximizada quando a função custo

²A densidade de pares de sítios mutuamente mais próximos em meios unidimensionais é $P_{1,1}^{(1)} = 2/3$ (Eq. (2.4)).

permite uma transição do tipo vítrea. Então, o processo de ótima exploração pode ocorrer numa dada temperatura e numa dada memória do caminhante ao longo da linha de transição vítrea. Nos próximos capítulos apresentamos nossos estudos em busca desta linha de transição.

3 *Modelo Analítico da Caminhada Estocástica do Turista*

Neste capítulo, apresentamos o formalismo analítico referente à Caminhada Estocástica do Turista com Memória (CET). A movimentação na caminhada é definida por uma função densidade de probabilidade (PDF) que tem como parâmetros a temperatura do meio desordenado, a janela de memória do caminhante e a função custo que depende das distâncias entre sítios. Esta PDF deve ser escrita de tal modo a favorecer os saltos para sítios mais próximos em temperaturas baixas. A temperatura caracteriza a agitação térmica dos caminhantes, ou seja, a mobilidade dos caminhantes. A janela de memória define os últimos sítios visitados que são proibidos durante as tomadas de decisão. Por fim, a função custo determina o custo energético no salto de um sítio para outro, para nossos propósitos, esta função é monótona crescente. Nosso objetivo é compreender a dependência da CET com a temperatura e com a memória. Além disso, obter orientação para implementação computacional, que está descrita no Cap. 4.

Considere que sobre um segmento de reta de tamanho $L = 1$, distribuimos aleatoriamente de forma uniforme e independente N sítios. Nosso objetivo é calcular, em cada intervalo de tempo, a probabilidade de um caminhante com memória μ sair de um dado sítio S_i e chegar a outro sítio S_j . Vamos usar o formalismo de matrizes de densidade, que está definida na Sec. 3.1, e calcular as probabilidades de salto entre sítios (Sec. 3.2). Além disso, calculamos a probabilidade de um salto sem revisita no Cap. 7.

É importante destacar que as definições do formalismo de matrizes de densidade em nosso problema são dependentes da memória μ do caminhante e do inverso da temperatura T do meio desordenado ($\beta = 1/T$). A memória define uma janela dos últimos μ sítios visitados, que são proibidos de re-visitação nos próximos μ passos da caminhada. Já a temperatura pode aumentar (diminuir) a agitação do caminhante, permitindo (não permitindo) saltos para sítios mais distantes.

3.1 Desenvolvimento do modelo

Considere N sítios distribuídos por um processo espacial de Poisson¹ num segmento unitário e um caminhante, que andou N_p passos sobre estes sítios, com memória μ . Com isso, definimos dois conjuntos:

1. Todos os sítios: $\mathbb{T} = \{S_1, S_2, \dots, S_N\}$, onde os índices são os rótulos dos sítios;
2. Sítios proibidos no passo t pela janela de memória: $\mathbb{F}(t) = \{S_{(t-(\mu-1))}, S_{(t-(\mu-2))}, \dots, S_{(t)}\}$, observe que $t = t - (\mu - \mu)$, de forma que este conjunto contém μ elementos, e os índices representam a posição do sítio na trajetória realizada pelo caminhante.

Sendo que $\mathbb{F}(t) \subset \mathbb{T}$. Também é conveniente, definir o conjunto $\mathbb{K}(t)$ que relaciona os índices de $\mathbb{F}(t)$ com os índices de $\mathbb{T}$ da forma $\mathbb{K}(t) = \{k | S_k \in \mathbb{F}(t)\}$.

No formalismo de matrizes de densidade, cada sítio é representado como sendo o valor unitário na respectiva componente do vetor de estados, que tem N componentes. Assim, podemos dizer que cada sítio representa um possível estado para o sistema em questão, e:

$$|S_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, |S_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \dots, |S_N\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Os vetores transpostos são dados por $\langle S_1| = (1 \ 0 \ \dots \ 0)$, $\langle S_2| = (0 \ 1 \ \dots \ 0)$, $\dots$, $\langle S_N| = (0 \ 0 \ \dots \ 1)$. Desta maneira, é fácil demonstrar que $\langle S_j | S_i \rangle = \delta_{j,i}$, $\sum_{i=1}^N \langle S_i | S_i \rangle = N$ e $\sum_{k=1}^N |S_k\rangle \langle S_k| = \mathbb{1}$, onde $\mathbb{1}$ é a matriz identidade $N \times N$.

A seguir, a definição de operadores e coeficientes que atuam em nosso problema.

3.1.1 Memória $M^{(\mu)}(t) = \mathbb{1} - \sum_{k \in \mathbb{K}} |S_k\rangle \langle S_k|$

O operador $M^{(\mu)}(t)$ é representado por uma matriz diagonal $N \times N$ com elementos unitários, caso $S_j \notin \mathbb{F} \Rightarrow M_{j,j}^{(\mu)}(t) = 1$, e elementos nulos, caso contrário ($S_j \in \mathbb{F} \Rightarrow M_{j,j}^{(\mu)}(t) = 0$). Por isso, é um operador dependente do tempo, ou seja, a cada passo do caminhante, os elementos da diagonal desta matriz são atualizados de acordo com a evolução do conjunto $\mathbb{F}$.

Quando este operador é aplicado sobre $|S_i\rangle$, a matriz que representa $M^{(\mu)}(t)$ é atualizada. Em seguida, ao ser projetado em $\langle S_j|$, somente o elemento $M_{j,j}^{(\mu)}(t)$ desta matriz é importante,

¹Uma revisão sobre processo espacial de Poisson se encontra na Sec. 2.2.

pois é ele que informa se o sítio $\langle S_j |$ pode ou não ser visitado. Demonstramos isso da seguinte forma. O elemento $M_{j,i}^{(\mu)}(t)$ é dado por:

$$\begin{aligned} M_{j,i}^{(\mu)}(t) &= \langle S_j | \mathbb{M}^{(\mu)}(t) | S_i \rangle = \langle S_j | \mathbb{1} | S_i \rangle - \sum_{k \in \mathbb{K}} \langle S_j | S_k \rangle \langle S_k | S_i \rangle \\ &= \langle S_j | S_i \rangle - \sum_{k \in \mathbb{K}} \langle S_j | S_k \rangle \langle S_k | S_i \rangle = \delta_{j,i} - \sum_{k \in \mathbb{K}} \delta_{j,k} \delta_{k,i} \\ &= \begin{cases} i \neq j \Rightarrow M_{j,i}^{(\mu)}(t) = 0 \\ i = j \Rightarrow M_{j,j}^{(\mu)}(t) = 1 - \sum_{k \in \mathbb{K}} \delta_{k,j} = \begin{cases} j \notin \mathbb{K} \Rightarrow \delta_{k,j} = 0 \Rightarrow M_{j,j}^{(\mu)}(t) = 1 \\ j \in \mathbb{K} \Rightarrow \delta_{k,j} = 1 \Rightarrow M_{j,j}^{(\mu)}(t) = 0 \end{cases} \end{cases} \end{aligned}$$

Com este raciocínio, podemos escrever a aplicação de $\mathbb{M}^{(\mu)}(t)$ a $|S_i\rangle$ e projeção sobre $\langle S_j |$ da seguinte maneira:

$$\langle S_j | \mathbb{M}^{(\mu)}(t) | S_i \rangle = M_{j,j}^{(\mu)}(t) \delta_{j,i}, \quad (3.1)$$

onde enfatiza-se que $M_{j,j}^{(\mu)}(t) = 0$ para os sítios proibidos ou 1 para os sítios permitidos.

3.1.2 Custo $\mathbb{H}$

Diferentemente do operador memória, o operador custo não é dependente do tempo. Quando este operador é aplicado sobre $|S_i\rangle$ e projetado em $\langle S_j |$, obtemos

$$\langle S_j | \mathbb{H} | S_i \rangle = E(D_{j,i}), \quad (3.2)$$

sendo que $E(D_{j,i})$ é uma função monótona crescente da distância euclidiana normalizada² $D_{j,i}$. Para nossos fins, é desejável que este operador seja apresentado da forma $e^{-\beta \mathbb{H}}$, sendo assim, expandindo uma exponencial em série:

$$\langle S_j | e^{-\beta \mathbb{H}} | S_i \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \langle S_j | \left(\frac{\beta \mathbb{H}}{k!} \right)^k | S_i \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{\beta E(D_{j,i})}{k!} \right)^k = e^{-\beta E(D_{j,i})}. \quad (3.3)$$

3.1.3 Densidade $\rho^{(\beta, \mu)}(t) = \mathbb{M}^{(\mu)}(t) e^{-\beta \mathbb{H}}$

O operador densidade é definido considerando-se o peso da aplicação a $|S_i\rangle$ e projeção em $\langle S_j |$, que depende:

1. da janela de proibidos dada pelo operador memória $\mathbb{M}^{(\mu)}(t)$,

²A distância euclidiana normalizada está definida na seção 2.1.

2. do inverso da temperatura ($\beta = 1/T$) e
3. do custo do salto entre os sítios definidos por estes vetores.

Sendo assim, usando as equações (3.1) e (3.3), quando $\rho^{(\beta, \mu)}(t)$ é aplicado sobre $|S_i\rangle$ e projetado em $\langle S_j|$, descrevemos a interação entre os operadores memória e custo, e obtemos:

$$\begin{aligned} \langle S_j | \rho^{(\beta, \mu)}(t) | S_i \rangle &= \langle S_j | \mathbb{M}^{(\mu)}(t) e^{-\beta \mathbb{H}} | S_i \rangle \\ &= \sum_k \underbrace{\langle S_j | \mathbb{M}^{(\mu)}(t) | S_k \rangle}_{M_{j,j}^{(\mu)}(t) \delta_{j,k}} \underbrace{\langle S_k | e^{-\beta \mathbb{H}} | S_i \rangle}_{e^{-\beta E(D_{k,i})}} = M_{j,j}^{(\mu)}(t) e^{-\beta E(D_{j,i})}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

3.1.4 Probabilidade de salto a partir do sítio S_i : $\mathbb{P}_i^{(\beta, \mu)}(t)$

Antes de definir o operador probabilidade de salto, vamos definir o coeficiente de normalização. Podemos entender este coeficiente como sendo a soma dos elementos da linha i da matriz que representa a aplicação do operador $\rho^{(\beta, \mu)}(t)$ ao estado $|S_i\rangle$ e projeção sobre todos os outros estados. Sendo assim, este coeficiente de normalização é dado por:

$$Z_i^{(\beta, \mu)}(t) = \sum_{k=1}^N \langle S_k | \rho^{(\beta, \mu)}(t) | S_i \rangle = \sum_{k=1}^N M_{k,k}^{(\mu)}(t) e^{-\beta D_{k,i}}. \quad (3.5)$$

É importante destacar que a soma em k deste coeficiente exclui os sítios proibidos pela janela de memória μ , pois $M_{k,k}^{(\mu)}(t)$ é nulo neste caso. Esta exclusão acontece naturalmente quando usamos o operador $\mathbb{M}^{(\mu)}(t)$, evitamos, assim, o uso de restrições no somatório.

O operador probabilidade, quando aplicado ao sítio $|S_i\rangle$ e projetado sobre o sítio $\langle S_j|$, fornece a probabilidade de sair de $|S_i\rangle$ e chegar a $\langle S_j|$. Podemos, então, definir o operador probabilidade em função de $\rho^{(\beta, \mu)}(t)$ e de $Z_i^{(\beta, \mu)}(t)$:

$$\mathbb{P}_i^{(\beta, \mu)}(t) = \frac{\rho^{(\beta, \mu)}(t)}{Z_i^{(\beta, \mu)}(t)} = \frac{\mathbb{M}^{(\mu)}(t) e^{-\beta \mathbb{H}}}{Z_i^{(\beta, \mu)}(t)}. \quad (3.6)$$

Assim, a probabilidade de sair do estado i e chegar ao estado j vale:

$$\langle S_j | \mathbb{P}_i^{(\beta, \mu)}(t) | S_i \rangle = \frac{M_{j,j}^{(\mu)}(t) e^{-\beta E(D_{j,i})}}{\sum_{k=1}^N M_{k,k}^{(\mu)}(t) e^{-\beta E(D_{k,i})}} = P_{j,i}^{(\beta, \mu)}(t). \quad (3.7)$$

Podemos destacar duas propriedades deste operador:

$$\sum_{i=1}^N \langle S_j | \mathbb{P}_i^{(\beta, \mu)}(t) | S_i \rangle = 1, \quad (3.8)$$

que reflete a normalização e

$$\sum_{i,j=1}^N \langle S_j | \mathbb{P}_i^{(\beta, \mu)}(t) | S_i \rangle = N, \quad (3.9)$$

que representa o número de estados.

Nota-se que, com esta definição, o próximo sítio $\langle S_j |$ a ser visitado pode ser o próprio sítio $|S_i\rangle$, quando $S_j = S_i$. Neste caso, a probabilidade será não-nula somente se a memória do caminhante permitir, isto é, $M_{i,i}^{(\mu)}(t) \neq 0$, o que somente acontece para $\mu = 0$.

3.2 Probabilidade de Sair do Sítio Inicial S_i e Andar N_p Passos

Com os operadores descritos anteriormente e considerando o meio desordenado, descrito nas Secs. 2.1 e 2.2, podemos definir a probabilidade de um caminhante sair do sítio S_i e após N_p passos chegar ao sítio S_j . Em outras palavras, podemos encontrar a probabilidade de salto entre um estado inicial e um estado final. Como existem vários caminhos que geram este salto efetivo, e estes caminhos apresentam probabilidades de ocorrência diferentes, vamos prosseguir nossa descrição da dinâmica da caminhada usando apenas caminhos entre os sítios inicial e final, que apresente probabilidade de ocorrência não nula. A seguir, mostramos, de forma detalhada, nosso raciocínio para eliminar as trajetórias que apresentem probabilidade nula. Depois, mostramos como determinar esta probabilidade nos limites de alta e de baixa temperaturas.

3.2.1 Arbitrários passos considerando apenas um caminho entre S_i e S_j

Mostramos aqui nosso raciocínio variando o número N_p de passos que o caminhante deve andar para sair do sítio (estado) S_i e chegar ao sítio (estado) S_j . Todos os sítios intermediários são fixos, isto é, estamos considerando apenas uma única trajetória (caminho) entre os sítios inicial e final. Assim,

- **Um passo, $N_p = 1$.** A probabilidade de sair do sítio S_i e em $N_p = 1$ passo chegar ao sítio S_j é encontrada quando aplicamos o operador probabilidade de salto ao sítio $|S_i\rangle$ e o projetamos em $\langle S_j |$:

$$\langle S_j | \mathbb{P}_i^{(\beta, \mu)}(1) | S_i \rangle = P_{j,i}^{(\beta, \mu)}(1). \quad (3.10)$$

Esquemáticamente, este processo pode ser observado na Fig. 3.1. Enfatizamos que

1. se $\mu = 0$ esta probabilidade será sempre não nula, mesmo se $S_i = S_j$,

Figura 3.1: Salto do sítio S_i ao S_j , num único passo. A probabilidade deste salto é dada pela Eq. (3.10).

2. se $\mu \geq 1$, ou seja, $\mu \geq N_p$ a probabilidade de salto entre os sítios S_i e S_j será não nula somente se $S_i \neq S_j$.
- **Dois passos**, $N_p = 2$. A probabilidade de sair de S_i chegar a S_j passando pelo sítio fixado S_{k_1} é:

$$\langle S_j | \mathbb{P}_{k_1}^{(\beta, \mu)}(2) | S_{k_1} \rangle \langle S_{k_1} | \mathbb{P}_i^{(\beta, \mu)}(1) | S_i \rangle = P_{j, k_1}^{(\beta, \mu)}(2) P_{k_1, i}^{(\beta, \mu)}(1). \quad (3.11)$$

Nota-se que

1. caso $\mu = 0$ esta probabilidade será sempre diferente de zero, mesmo se $S_i = S_{k_1} = S_j$,
2. caso $\mu = 1$ a expressão (3.11) será não nula se $S_i \neq S_{k_1}$ e $S_{k_1} \neq S_j$, sendo que S_i pode ou não ser igual a S_j ,
3. entretanto, caso $\mu \geq N_p$ a probabilidade de salto entre os sítios S_i e S_j será não nula somente se $S_i \neq S_{k_1} \neq S_j$.

A Fig. 3.2 ilustra este processo de salto.

Figura 3.2: Salto entre os sítios S_i e S_j passando pelo sítio S_{k_1} . A probabilidade deste salto é dada pela Eq. (3.11).

- **Três passos**, $N_p = 3$. A probabilidade de sair de S_i chegar a S_j passando pelos sítios fixados S_{k_1} e S_{k_2} é:

$$\langle S_j | \mathbb{P}_{k_2}^{(\beta, \mu)}(3) | S_{k_2} \rangle \langle S_{k_2} | \mathbb{P}_{k_1}^{(\beta, \mu)}(2) | S_{k_1} \rangle \langle S_{k_1} | \mathbb{P}_i^{(\beta, \mu)}(1) | S_i \rangle = P_{j, k_2}^{(\beta, \mu)}(3) P_{k_2, k_1}^{(\beta, \mu)}(2) P_{k_1, i}^{(\beta, \mu)}(1). \quad (3.12)$$

Podemos dizer que:

1. caso $\mu = 0$ esta probabilidade será sempre diferente de zero,
2. caso $\mu = 1$ a expressão (3.12) será não nula se $S_i \neq S_{k_1}$ e $S_{k_2} \neq S_j$ com $S_{k_1} \neq S_{k_2}$, sendo que S_i pode ou não ser igual a S_j ,
3. caso $\mu = 2$ esta probabilidade de salto será não nula se $S_i \neq S_{k_1} \neq S_{k_2}$ e $S_{k_1} \neq S_{k_2} \neq S_j$, sendo que, novamente, S_i pode ou não ser igual a S_j ,

4. caso $\mu \geq N_p$ esta probabilidade de salto será não nula somente se todos os sítios forem distintos, $S_i \neq S_{k_1}, S_i \neq S_{k_2}, S_i \neq S_j, S_{k_1} \neq S_{k_2}, S_{k_1} \neq S_j, S_{k_2} \neq S_j$.
- N_p passos. A probabilidade de sair de S_i chegar a S_j passando pelos sítios fixados S_{k_a} , $a = 1, 2, \dots, (N_p - 1)$ é:

$$\begin{aligned}
 \langle S_j | \mathbb{P}_{k_{N_p-1}}^{(\beta, \mu)}(N_p) | S_{k_{N_p-1}} \rangle & \dots \langle S_{k_2} | \mathbb{P}_{k_1}^{(\beta, \mu)}(2) | S_{k_1} \rangle \langle S_{k_1} | \mathbb{P}_i^{(\beta, \mu)}(1) | S_i \rangle \\
 & = P_{j, k_{N_p-1}}^{(\beta, \mu)}(N_p) \dots P_{k_2, k_1}^{(\beta, \mu)}(2) P_{k_1, i}^{(\beta, \mu)}(1) \\
 & = P_{j, k_{N_p-1}}^{(\beta, \mu)}(N_p) \left(\prod_{r=1}^{N_p-2} P_{k_{r+1}, k_r}^{(\beta, \mu)}(r+1) \right) P_{k_1, i}^{(\beta, \mu)}(1). \quad (3.13)
 \end{aligned}$$

Note que, devido à memória, esta probabilidade será nula se um dos sítios intermediários for proibido de visitaço. Assim, para diferentes memórias, teremos diferentes restrições quanto ao próximo sítio intermediário a ser visitado. Podemos destacar dois casos em que a probabilidade será, impreterivelmente, diferente de zero:

1. caso $\mu = 0$ a probabilidade será sempre não nula,
2. caso $\mu \geq N_p$ esta probabilidade de salto será não nula somente se todos os sítios desta trajetória forem distintos.

A Fig. 3.3 esquematiza um salto com $N_p = 6$ passos e $\mu = 2$, lembrando que para esta memória, o caminhante não pode permanecer no mesmo sítio e não pode voltar ao último sítio visitado.

Figura 3.3: Salto entre os sítios S_i e S_j em $N_p = 6$ passos e $\mu = 2$. A trajetória é composta pelos sítios inicial S_i , final S_j e intermediários S_k , $k = 4, 5, 6, 7$ e 8 .

3.2.2 Probabilidade de salto entre sítios no limite de alta temperatura

No limite de alta temperatura ($\beta \rightarrow 0$) o operador custo $e^{-\beta H}$ perde a dependência com a distância entre sítios e o fator exponencial do operador probabilidade, dado pela Eq. (3.6), se reduz à $e^0 = 1$. Assim, a probabilidade de salto entre dois sítios é dependente apenas da memória do caminhante. Destacamos os dois casos:

- a) **Caso $\mu = 0$.** Nesta condição, na Eq. (3.7) teremos sempre $M_{k,k}^{(\mu)}(t) = 1$, sendo k o índice do sítios. Assim, a probabilidade de salto do sítio S_{k_1} ao sítio S_{k_2} no passo t é $P_{k_2,k_1}^{(\beta,\mu)}(t) = 1/N$, para qualquer par de sítios S_{k_1}, S_{k_2} em qualquer passo t . Desta forma, usando (3.13) escrevemos a probabilidade de salto em N_p passos entre os sítios S_i e S_j , passando por $N_p - 1$ sítios intermediários, considerando apenas um caminho:

$$\tilde{P}_{S_j \leftarrow S_i}^{(N_p)} = \frac{1}{N} \left(\prod_{r=1}^{N_p-2} \frac{1}{N} \right) \frac{1}{N} = \frac{1}{N} \left(\frac{1}{N} \right)^{N_p-2} \frac{1}{N} = \left(\frac{1}{N} \right)^{N_p}. \quad (3.14)$$

- b) **Caso $\mu \geq 1$.** Com esta condição, o operador memória fornece $M_{k,k}^{(\mu)}(t) = 1$ ou $M_{k,k}^{(\mu)}(t) = 0$, sendo k o índice do sítios. Como a janela de memória proíbe μ sítios, a cada passo, μ sítios têm probabilidade nula de visitaço, assim, a probabilidade de cada salto do sítio S_{k_1} ao sítio S_{k_2} no passo t é $P_{k_2,k_1}^{(\beta,\mu)}(t) = 1/(N - \mu)$, se $M_{k_2,k_2}^{(\mu)}(t) = 1$ ou $P_{k_2,k_1}^{(\beta,\mu)}(t) = 0$, se $M_{k_2,k_2}^{(\mu)}(t) = 0$. Novamente, usando a Eq. (3.13) escrevemos a probabilidade de salto entre os sítios S_i e S_j em N_p passos, passando por $N_p - 1$ sítios intermediários, considerando apenas um caminho:

$$\tilde{P}_{S_j \leftarrow S_i}^{(N_p)} = \begin{cases} \left(\frac{1}{N-\mu} \right)^{N_p} & , M_{k,k}^{(\mu)}(t) = 1, \forall k \text{ desta trajetria,} \\ 0 & , M_{k,k}^{(\mu)}(t) = 0, \text{ pelo menos um stio intermedirio proibido.} \end{cases} \quad (3.15)$$

Observe que a Eq. (3.15) generaliza o resultado da Eq. (3.14). Todos os stios, que no esto na janela de stios proibidos, apresentam a mesma probabilidade de serem visitados. No primeiro caso ($\mu = 0$), podemos afirmar que o sistema ergdico, visto que, o caminhante pode ser encontrado em qualquer um dos stios (o sistema se encontra em qualquer um de seus estados) com a mesma probabilidade. Alm disso, podemos afirmar que neste caso o sistema se encontra em equilbrio, j que o balano detalhado satisfeito, $P_{j,i}^{(\beta,0)} = P_{i,j}^{(\beta,0)}$, independente do nmero de passos entre S_i e S_j .

3.2.3 Probabilidade de salto entre sítios no limite de baixa temperatura

No limite de baixa temperatura ($\beta \gg 1$), é apropriado definirmos uma nova classificação da vizinhança de um sítio. Lembre que, a probabilidade de salto dada pela Eq. (3.7) privilegia transições localizadas quando $T \ll 1$. Assim, neste limite, a cada passo, o caminhante salta para o sítio permitido que apresenta a menor distância, ou seja, que apresenta a maior probabilidade. Chamaremos este sítio de *primeiro vizinho acessível*, que, como veremos, em algumas situações coincide com o primeiro vizinho geométrico. Sendo assim, cada sítio apresenta uma vizinhança acessível que compreende os: primeiro vizinho acessível, segundo vizinho acessível, terceiro vizinho acessível, ... N -ésimo vizinho acessível.

Para calcularmos as probabilidades de salto, Eq. (3.7), é conveniente representarmos o operador densidade dado pela Eq. (3.4) por uma matriz $N \times N$ e ordenarmos, a cada passo, cada linha desta matriz em ordem crescente. Em outras palavras, cada linha da matriz que representa o operador densidade apresenta na coluna mais a esquerda o elemento de menor valor, que corresponde ao último vizinho acessível, e na coluna mais a direita o de maior valor, que corresponde ao primeiro vizinho acessível.

Chamamos esta matriz de densidade ordenada e seus elementos não nulos são escritos da forma $e^{-\beta E(A_i^{(k)})}$, onde o índice i representa o sítio S_i , onde se encontra o caminhante, e $A_i^{(k)}$ indica a distância do k -ésimo vizinho acessível ao sítio S_i , com $k = 1, 2, \dots, N$. Usamos a notação $A_i^{(k)}$ para fazer distinção entre vizinhos acessíveis e vizinhos geométricos. A notação deste último é $D_i^{(k)}$, sendo $k = 0, 1, \dots, N-1$, e indica a distância do k -ésimo vizinho geométrico ao sítio S_i . Os elementos nulos ocorrem devido à memória do caminhante através do termo $M_{j,j}^{(\mu)}(t)$. Note que o coeficiente de normalização $Z_i^{(\beta,0)}(t)$ também pode ser calculado a partir desta matriz.

A seguir, descrevemos detalhadamente como calculamos a probabilidade de salto em cada passo de uma caminhada quando usamos memória $\mu = 0, 1, 2$ e 3 .

3.2.3.1 Memória $\mu = 0$

Partindo do sítio S_i , para o primeiro passo, temos uma matriz densidade ordenada semelhante a matriz apresentada abaixo:

$$\left(\mathbb{M}^{(0)}(1)e^{-\beta \mathbb{H}} \right)_{ordenada} = \begin{pmatrix} e^{-\beta E(A_1^{(N)})} & \dots & e^{-\beta E(A_1^{(2)})} & e^{-\beta E(A_1^{(1)})} \\ e^{-\beta E(A_2^{(N)})} & \dots & e^{-\beta E(A_2^{(2)})} & e^{-\beta E(A_2^{(1)})} \\ \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ e^{-\beta E(A_i^{(N)})} & \dots & e^{-\beta E(A_i^{(2)})} & e^{-\beta E(A_i^{(1)})} \\ \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ e^{-\beta E(A_N^{(N)})} & \dots & e^{-\beta E(A_N^{(2)})} & e^{-\beta E(A_N^{(1)})} \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

Como não há nenhuma restrição quanto ao próximo sítio a ser visitado ($M_{j,j}^{(0)}(t) = 1$, para qualquer passo t e qualquer sítio S_j), então, existe a equivalência mostrada na tabela 3.1. Observe

Tabela 3.1: Tabela de equivalência entre vizinhos acessíveis e vizinhos geométricos, para o caso $\mu = 0$.

Vizinho acessível	Vizinho geométrico
primeiro	próprio sítio
segundo	primeiro
terceiro	segundo
$\vdots$	$\vdots$
N-ésimo	(N-1)-ésimo

que a última coluna da matriz (3.16) apresenta os primeiros vizinhos acessíveis. Sendo assim, ao observar a tabela 3.1, para a linha do sítio S_i , vemos que o próximo sítio a ser visitado, o primeiro vizinho acessível, é o próprio sítio S_i . Portanto, no limite de baixa temperatura, quando o caminhante possui memória nula, a caminhada apresenta apenas 1 sítio, que é revisitado a cada passo com probabilidade:

$$P_{S_i, S_i}^{(\beta, 0)}(t) = \frac{e^{-\beta E(D_i^{(0)})}}{Z_i^{(\beta, 0)}(t)}. \quad (3.17)$$

Como $E(D)$ é uma função monótona crescente, assumimos que $e^{-\beta E(D_i^{(0)})}$ é o termo dominante no coeficiente de normalização $Z_i^{(\beta, 0)}(t)$, visto que, os outros termos serão imperativamente menores e podemos despezá-los. Então, escrevemos a probabilidade:

$$P_{S_i, S_i}^{(\beta, 0)}(t) = \frac{e^{-\beta E(D_i^{(0)})}}{e^{-\beta E(D_i^{(0)})}} = 1,$$

que mantém o caminhante preso no mesmo sítio no decorrer do tempo. Esta dinâmica também é encontrada na Caminhada Determinista do Turista (preguiçoso), como mostra a seção 2.3.1.

3.2.3.2 Memória $\mu = 1$

Novamente partindo do sítio S_i , no primeiro passo ($t = 1$), escrevemos uma matriz densidade da forma:

$$\left(\mathbb{M}^{(1)}(1)e^{-\beta \mathbb{H}} \right) = \begin{pmatrix} e^{-\beta E(D_{1,1})} & \dots & 0 & \dots & e^{-\beta E(D_{1,N-1})} & e^{-\beta E(D_{1,N})} \\ e^{-\beta E(D_{2,1})} & \dots & 0 & \dots & e^{-\beta E(D_{2,N-1})} & e^{-\beta E(D_{2,N})} \\ \vdots & \vdots & 0 & \vdots & \vdots & \vdots \\ e^{-\beta E(D_{i,1})} & \dots & 0 & \dots & e^{-\beta E(D_{i,N-1})} & e^{-\beta E(D_{i,N})} \\ \vdots & \vdots & 0 & \vdots & \vdots & \vdots \\ e^{-\beta E(D_{N,1})} & \dots & 0 & \dots & e^{-\beta E(D_{N,N-1})} & e^{-\beta E(D_{N,N})} \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

A coluna correspondente ao sítio S_i está zerada devido à memória do caminhante, que o impede de permanecer onde ele está. Quando ordenamos cada linha desta matriz, obtemos a matriz densidade ordenada:

$$\left(\mathbb{M}^{(1)}(1)e^{-\beta \mathbb{H}} \right)_{ordenada} = \begin{pmatrix} 0 & \dots & e^{-\beta E(A_1^{(2)})} & e^{-\beta E(A_1^{(1)})} \\ 0 & \dots & e^{-\beta E(A_2^{(2)})} & e^{-\beta E(A_2^{(1)})} \\ \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & e^{-\beta E(A_i^{(2)})} & e^{-\beta E(A_i^{(1)})} \\ \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & e^{-\beta E(A_N^{(2)})} & e^{-\beta E(A_N^{(1)})} \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

Sabemos que a memória $\mu = 1$ não permite que o caminhante permaneça no sítio S_i , que corresponde ao próprio sítio, assim, a equivalência da tabela 3.1 não é válida aqui. Então, o primeiro vizinho acessível de S_i , que chamaremos de S_{k_1} , corresponde ao seu primeiro vizinho geométrico. Dessa forma, podemos escrever a probabilidade de salto do primeiro passo da caminhada, saindo de S_i e chegando em S_{k_1} :

$$P_{S_{k_1}, S_i}^{(\beta, 1)}(1) = \frac{e^{-\beta E(D_i^{(1)})}}{Z_i^{(\beta, 1)}(1)}. \quad (3.20)$$

Os próximos passos apresentam matrizes densidade ordenada semelhante à matriz (3.19), assim, neste caso podemos escrever a probabilidade de salto de um sítio a seu primeiro vizinho acessível em qualquer passo t da forma:

$$P_{S_{k_{t+1}}, S_{k_t}}^{(\beta, 1)}(t) = \frac{e^{-\beta E(D_{k_t}^{(1)})}}{Z_{k_t}^{(\beta, 1)}(t)}. \quad (3.21)$$

Agora, podemos reescrever esta probabilidade, seguindo algumas aproximações. Primeiramente, devemos reescrever o coeficiente de normalização da forma:

$$\begin{aligned} Z_{k_t}^{(\beta,1)}(t) &= \underbrace{M_{k_t, k_t}^{(1)}(t)}_0 \underbrace{e^{-\beta E(D_{k_t}^{(0)})}}_1 + e^{-\beta E(D_{k_t}^{(1)})} \left(1 + \sum_{i=2}^{N-1} e^{-\beta \Delta_{k_t}^{(i)}} \right) \\ &= e^{-\beta E(D_{k_t}^{(1)})} \left(1 + \sum_{i=2}^{N-1} e^{-\beta \Delta_{k_t}^{(i)}} \right), \end{aligned} \quad (3.22)$$

onde, $\Delta_{k_t}^{(i)} = E(D_{k_t}^{(i)}) - E(D_{k_t}^{(1)})$. Observe que $M_{k_t, k_t}^{(1)}(t) = 0$, pois a memória do caminhante o impede de permanecer no mesmo sítio. Omitimos a multiplicação deste operador memória dentro do somatório, pois este será sempre 1, ou seja, os outros sítios são permitidos de visitação.

No limite de baixa temperatura, e sabendo que $E(D)$ é uma função monótona crescente, podemos assumir que $\sum_{i=2}^{N-1} e^{-\beta \Delta_{k_t}^{(i)}} \ll 1$, então:

$$Z_{k_t}^{(\beta,1)}(t) = e^{-\beta E(D_{k_t}^{(1)})}. \quad (3.23)$$

Da mesma forma, como o caminhante salta para o primeiro vizinho acessível, que corresponde ao primeiro vizinho geométrico, o caminhante salta uma distância $D_{k_t}^{(1)}$. Lembramos que esta é a distância euclidiana normalizada, ou seja, é a distância $\hat{D}_{k_t}^{(1)}/N$. Se assumirmos o limite termodinâmico ($N \gg 1$) e que a temperatura desce lentamente, então, assumimos que $\beta E(D_{k_t}^{(1)}) \ll 1$ e assim $e^{-\beta E(D_{k_t}^{(1)})} \approx 1$. Com isso, reescrevemos a expressão (3.21):

$$P_{S_{k_t+1}, S_{k_t}}^{(\beta,1)}(t) = \frac{1}{Z_{k_t}^{(\beta,1)}(t)} = e^{\beta E(D_{k_t}^{(1)})}, \quad (3.24)$$

sendo que S_{k_t+1} é primeiro vizinho geométrico de S_{k_t} .

A seguir, mostramos o mesmo raciocínio aplicado ao caminhante com memória $\mu = 2$.

3.2.3.3 Memória $\mu = 2$

Para este caso, devemos abordar o procedimento de cálculo das probabilidades de salto para os passos $t = 1$ e $t \geq 2$ separadamente.

Primeiro passo ($t = 1$). A partir do sítio S_i escrevemos a matriz densidade ordenada:

$$\left(\mathbb{M}^{(2)}(1)e^{-\beta H} \right)_{ordenada} = \begin{pmatrix} 0 & \dots & e^{-\beta E(A_1^{(2)})} & e^{-\beta E(A_1^{(1)})} \\ 0 & \dots & e^{-\beta E(A_2^{(2)})} & e^{-\beta E(A_2^{(1)})} \\ \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & e^{-\beta E(A_i^{(2)})} & e^{-\beta E(A_i^{(1)})} \\ \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & e^{-\beta E(A_N^{(2)})} & e^{-\beta E(A_N^{(1)})} \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

Igualmente ao caso $\mu = 1$, a coluna correspondente ao sítio S_i foi zerada devido à memória do caminhante. Sabemos que a memória $\mu = 2$ não permite que o caminhante permaneça no sítio S_i , que corresponde ao próprio sítio, assim, seu primeiro vizinho acessível, para o primeiro passo ($t = 1$), corresponde ao seu primeiro vizinho geométrico. Dessa forma, podemos escrever a probabilidade de salto do primeiro passo da caminhada, saindo de S_i e chegando em S_{k_1} :

$$P_{S_{k_1}, S_i}^{(\beta, 2)}(1) = \frac{e^{-\beta E(D_i^{(1)})}}{Z_i^{(\beta, 2)}(1)}, \quad (3.26)$$

que é equivalente à Eq. (3.21) e pode ser reescrita como a Eq. (3.24)

Segundo passo ($t \geq 2$). Partindo de S_{k_1} escrevemos a matriz densidade ordenada:

$$\left(\mathbb{M}^{(2)}(2)e^{-\beta H} \right)_{ordenada} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & e^{-\beta E(A_1^{(2)})} & e^{-\beta E(A_1^{(1)})} \\ 0 & 0 & \dots & e^{-\beta E(A_2^{(2)})} & e^{-\beta E(A_2^{(1)})} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & e^{-\beta E(A_{k_1}^{(2)})} & e^{-\beta E(A_{k_1}^{(1)})} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & e^{-\beta E(A_N^{(2)})} & e^{-\beta E(A_N^{(1)})} \end{pmatrix} \quad (3.27)$$

Agora, são duas colunas zeradas pois, devido à memória $\mu = 2$, o caminhante não pode permanecer no sítio S_{k_1} e não pode voltar ao sítio S_i . Então, para determinarmos o primeiro vizinho acessível de S_{k_1} , que é S_{k_2} , precisamos primeiramente discutir qual a ordem de vizinhança geométrica do primeiro vizinho acessível de S_{k_1} . Teremos que S_{k_2} é primeiro vizinho geométrico de S_{k_1} , se, e somente se, o primeiro vizinho geométrico de S_{k_1} **não** for S_i . Caso contrário, se o primeiro vizinho geométrico de S_{k_1} for S_i , então S_{k_2} é o segundo vizinho geométrico de S_{k_1} .

Como ilustra a Fig. 3.4, sabemos que S_{k_1} é primeiro vizinho de S_i , discutido anteriormente, no passo $t = 1$. Assim, a probabilidade de S_i também ser o primeiro vizinho geométrico de S_{k_1} é dada pela probabilidade de Cox, apresentada na descrição do meio desordenado, Sec. 2.1.1.

Figura 3.4: Os caminhos possíveis A e B da trajetória $S_i \rightarrow S_{k_1} \rightarrow S_{k_2}$. O primeiro passo, de S_i para S_{k_1} , o caminhante salta para o 1º vizinho geométrico. No segundo passo, o caminhante pode saltar para o 1º ou 2º vizinho geométrico com as probabilidades $P_{1^o} = 1/3$ e $P_{2^o} = 2/3$, respectivamente.

Usando a Eq. (2.4), encontramos que esta probabilidade para primeiros vizinhos geométricos mútuos em uma dimensão é $2/3$. Assim, a probabilidade de que S_i **não** seja o primeiro vizinho de S_{k_1} é $1 - 2/3 = 1/3$.

Com isso, escrevemos a probabilidade de salto para o segundo passo da caminhada $t = 2$, isto é, saindo de S_{k_1} e chegando a S_{k_2} , como a combinação das probabilidades de salto para o primeiro vizinho geométrico e para o segundo vizinho geométrico:

$$P_{S_{k_2}, S_{k_1}}^{(\beta, 2)}(2) = \frac{1}{3} \frac{e^{-\beta E(D_{k_1}^{(1)})}}{Z_{A, k_1}^{(\beta, 2)}(2)} + \frac{2}{3} \frac{e^{-\beta E(D_{k_1}^{(2)})}}{Z_{B, k_1}^{(\beta, 2)}(2)}, \quad (3.28)$$

onde $Z_{A, k_t}^{(\beta, 2)}(t)$ e $Z_{B, k_t}^{(\beta, 2)}(t)$ são os coeficientes de normalização quando o caminhante salta para o primeiro vizinho geométrico (caminho A da Fig. 3.4) e para o segundo vizinho geométrico (caminho B da Fig. 3.4), respectivamente. Separamos os coeficientes de normalização em $Z_{A, k_t}^{(\beta, 2)}(t)$ e $Z_{B, k_t}^{(\beta, 2)}(t)$, pois seu valor será diferente caso o caminhante visite o primeiro ou o segundo vizinho geométrico, como mostramos adiante.

Os próximos passos da caminhada seguem este mesmo raciocínio, assim, podemos escrever a probabilidade de salto entre sítios da caminhada, a partir de $t = 2$ como:

$$P_{S_{k_{t+1}}, S_{k_t}}^{(\beta, 2)}(t) = \frac{1}{3} \frac{e^{-\beta E(D_{k_t}^{(1)})}}{Z_{A, k_t}^{(\beta, 2)}(t)} + \frac{2}{3} \frac{e^{-\beta E(D_{k_t}^{(2)})}}{Z_{B, k_t}^{(\beta, 2)}(t)}, \quad t \geq 2. \quad (3.29)$$

Como no caso anterior, podemos reescrever esta probabilidade, seguindo algumas aproximações. Começamos reescrevendo os dois coeficientes de normalização, um para quando o salto ocorre para o primeiro vizinho geométrico e outro para quando o salto ocorre para o segundo vizinho geométrico. No primeiro caso, teremos o coeficiente $Z_{A, k_t}^{(\beta, 2)}(t)$ e, para o segundo

caso, o coeficiente $Z_{B,k_t}^{(\beta,2)}(t)$.

$$\begin{aligned} Z_{A,k_t}^{(\beta,2)}(t) &= \underbrace{M_{k_t,k_t}^{(2)}(t)}_0 \underbrace{e^{-\beta E(D_{k_t}^{(0)})}}_1 + e^{-\beta E(D_{k_t}^{(1)})} + \underbrace{M_{k_{t+1},k_{t+1}}^{(2)}(t)}_0 e^{-\beta E(D_{k_t}^{(2)})} + \sum_{i=3}^{N-1} e^{-\beta E(D_{k_t}^{(i)})} \\ &= e^{-\beta E(D_{k_t}^{(1)})} + \sum_{i=3}^{N-1} e^{-\beta E(D_{k_t}^{(i)})} ; \end{aligned} \quad (3.30)$$

$$\begin{aligned} Z_{B,k_t}^{(\beta,2)}(t) &= \underbrace{M_{k_t,k_t}^{(2)}(t)}_0 \underbrace{e^{-\beta E(D_{k_t}^{(0)})}}_1 + \underbrace{M_{k_{t+1},k_{t+1}}^{(2)}(t)}_0 e^{-\beta E(D_{k_t}^{(1)})} + e^{-\beta E(D_{k_t}^{(2)})} + \sum_{i=3}^{N-1} e^{-\beta E(D_{k_t}^{(i)})} \\ &= e^{-\beta E(D_{k_t}^{(2)})} + \sum_{i=3}^{N-1} e^{-\beta E(D_{k_t}^{(i)})} . \end{aligned} \quad (3.31)$$

Observe que $M_{k_t,k_t}^{(2)}(t) = 0$, pois, novamente, a memória do caminhante o impede de permanecer no mesmo sítio. Assim também, $M_{k_{t+1},k_{t+1}}^{(2)}(t) = 0$, pois, a cada passo, dois sítios são proibidos de visitação. Na Eq. (3.30) dizemos que o segundo vizinho geométrico é proibido e na Eq. (3.31) o primeiro vizinho geométrico é proibido, porque assumimos que no limite de baixa temperatura o caminhante partiu do primeiro ou segundo vizinho geométrico. Outra vez omitimos a multiplicação do operador memória dentro do somatório, pois os outros sítios são permitidos de visitação.

Se assumirmos que $D_{k_t}^{(i)} \gg D_{k_t}^{(1)}$ e $D_{k_t}^{(i)} \gg D_{k_t}^{(2)}$, para $i = 3, 4, \dots, N-1$, no limite de baixa temperatura, teremos $\sum_{i=3}^{N-1} e^{-\beta E(D_{k_t}^{(i)})} \ll 1$ e poderemos desprezá-lo. Assim:

$$Z_{A,k_t}^{(\beta,2)}(t) = e^{-\beta E(D_{k_t}^{(1)})} ; \quad (3.32)$$

$$Z_{B,k_t}^{(\beta,2)}(t) = e^{-\beta E(D_{k_t}^{(2)})} . \quad (3.33)$$

Neste limite, o caminhante salta para o primeiro ou segundo vizinho geométrico. Da mesma forma que para $\mu = 1$, o caminhante salta uma distância $D_{k_t}^{(1)}$ ou $D_{k_t}^{(2)}$. Estas distâncias euclidianas normalizadas são dadas por $\hat{D}_{k_t}^{(1)}/N$ e $\hat{D}_{k_t}^{(2)}/N$. Assumindo o limite termodinâmico ($N \gg 1$) e que a temperatura decresce lentamente, então, assumimos que $\beta E(D_{k_t}^{(1)}) \ll 1$ e $\beta E(D_{k_t}^{(2)}) \ll 1$. Desse modo, $e^{-\beta E(D_{k_t}^{(1)})} \approx 1$ e $e^{-\beta E(D_{k_t}^{(2)})} \approx 1$. Com isso reescrevemos a Eq. (3.29):

$$P_{S_{k_{t+1}}, S_{k_t}}^{(\beta,2)}(t) = \frac{1}{3} \left[e^{\beta E(D_{k_t}^{(1)})} + 2e^{\beta E(D_{k_t}^{(2)})} \right] , \quad t \geq 2 . \quad (3.34)$$

À medida que aumentamos a memória do caminhante, aumenta a dificuldade em determinar a probabilidade de vizinhança geométrica do próximo sítio a ser visitado (primeiro vizinho

acessível), a seguir o caso de caminhante com memória $\mu = 3$.

3.2.3.4 Memória $\mu = 3$

Neste caso, os primeiros dois passos da caminhada são equivalentes aos passos $t = 1$ e 2 do caso $\mu = 2$. Assim, escrevemos:

$$P_{S_{k_1}, S_i}^{(\beta, 3)}(1) = e^{\beta E(D_{k_t}^{(1)})}, \quad 1^\circ \text{ passo}, \quad (3.35)$$

$$P_{S_{k_2}, S_{k_1}}^{(\beta, 3)}(2) = \frac{1}{3} \left[e^{\beta E(D_{k_t}^{(1)})} + 2e^{\beta E(D_{k_t}^{(2)})} \right], \quad 2^\circ \text{ passo}. \quad (3.36)$$

Para o terceiro passo, temos a matriz densidade ordenada como segue:

$$\left(\mathbb{M}^{(3)}(3)e^{-\beta \mathbb{H}} \right)_{ordenada} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & e^{-\beta E(A_1^{(2)})} & e^{-\beta E(A_1^{(1)})} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & e^{-\beta E(A_2^{(2)})} & e^{-\beta E(A_2^{(1)})} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & e^{-\beta E(A_{k_2}^{(2)})} & e^{-\beta E(A_{k_2}^{(1)})} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & e^{-\beta E(A_N^{(2)})} & e^{-\beta E(A_N^{(1)})} \end{pmatrix} \quad (3.37)$$

Três colunas estão zeradas porque, devido à memória $\mu = 3$, o caminhante não pode permanecer no sítio S_{k_2} e não pode voltar aos sítios S_{k_1} e S_i .

Observe a Fig. 3.5, para determinarmos o primeiro vizinho acessível de S_{k_2} , que é S_{k_3} , precisamos considerar que S_{k_3} é primeiro, segundo ou terceiro vizinho geométrico de S_{k_2} . Assim a trajetória $S_i \rightarrow S_{k_1} \rightarrow S_{k_2} \rightarrow S_{k_3}$ apresenta seis caminhos diferentes, A , B , C , D , E e F . As probabilidades destes caminhos são dadas pelas probabilidades do caminhante saltar para o primeiro **ou** segundo vizinho no segundo passo e de saltar para o primeiro, segundo **ou** terceiro vizinho geométrico no terceiro passo.

No primeiro passo, o caminhante salta para o 1º vizinho geométrico. No segundo passo, o caminhante pode saltar para o 1º ou 2º vizinho geométrico, e as respectivas probabilidades são encontradas conforme discussão no caso $\mu = 2$. Para o terceiro passo, raciocinamos da forma:

- S_{k_3} é primeiro vizinho geométrico de S_{k_2} se S_{k_1} **não** é primeiro vizinho de S_{k_2} e S_i **não** é primeiro vizinho de S_{k_2} .
- S_{k_3} é terceiro vizinho geométrico de S_{k_2} se (i) S_{k_1} é primeiro vizinho de S_{k_2} e S_i é segundo vizinho de S_{k_2} **ou** (ii) S_{k_1} é segundo vizinho de S_{k_2} e S_i é primeiro vizinho de S_{k_2} .
- S_{k_3} é segundo vizinho geométrico de S_{k_2} se os dois itens acima falharem.

Figura 3.5: As seis possíveis trajetórias $S_i \rightarrow S_{k1} \rightarrow S_{k2} \rightarrow S_{k3}$. O primeiro passo, de S_i para S_{k1} , o caminhante salta para o 1º vizinho geométrico. No segundo passo, o caminhante pode saltar para o 1º ou 2º vizinho geométrico com as probabilidades $P_{1^o} = 1/3$ e $P_{2^o} = 2/3$, respectivamente. Já no terceiro passo, o caminhante salta para o 1º, 2º ou 3º vizinho, com as probabilidades $P_{1^o} = 4/15$, $P_{2^o} = 5/15$ e $P_{3^o} = 6/15$, respectivamente.

Novamente usando a probabilidade de Cox, ($P_{m,n}^{(d)}$ dado pela Eq. (2.3)), escrevemos as probabilidades de que:

1. S_{k1} seja o primeiro vizinho de S_{k2} : $P_1 = P_{1,1}^{(1)} = 2/3$,
2. S_i seja o primeiro vizinho de S_{k2} : $P_2 = \sum_{n=1}^{\infty} P_{1,n}^{(1)} = 1/5$,
3. S_{k1} **não** seja o primeiro vizinho de S_{k2} : $P_3 = 1 - P_{1,1}^{(1)} = 1 - P_1 = 1/3$,
4. S_i **não** seja o primeiro vizinho de S_{k2} : $P_4 = 1 - \sum_{n=1}^{\infty} P_{1,n}^{(1)} = 1 - P_2 = 4/5$,
5. S_{k1} seja o segundo vizinho de S_{k2} : $P_5 = P_{2,1}^{(1)} = 2/9$,
6. S_i seja o segundo vizinho de S_{k2} : $P_6 = \sum_{n=2}^{\infty} P_{2,n}^{(1)} = 2/3$.

Os somatórios destas probabilidades surgem pois, para encontrar a probabilidade de certo sítio ser m -ésimo vizinho de um sítio de interesse, devemos considerar que o sítio de interesse pode ter qualquer vizinhança a partir de seu m -ésimo vizinho. Além disso, assumimos $N \gg 1$ (limite termodinâmico) e somamos n até ∞ . Escrevemos, então, a probabilidade de que:

1. S_{k3} seja o primeiro vizinho de S_{k2} : $P_{1^o} = P_3 P_4 = 4/15$,
2. S_{k3} seja o terceiro vizinho de S_{k2} : $P_{3^o} = P_1 P_6 + P_2 P_5 = 6/15$,
3. S_{k3} seja o segundo vizinho de S_{k2} : $P_{2^o} = 1 - (P_{1^o} + P_{3^o}) = 5/15$.

Com isso, a probabilidade de cada caminho, dada pela multiplicação das probabilidades de vizinhança em cada salto, é:

$$\begin{aligned} P(A) &= \frac{4}{45}, & P(B) &= \frac{5}{45}, & P(C) &= \frac{6}{45}, \\ P(D) &= \frac{8}{45}, & P(E) &= \frac{10}{45}, & P(F) &= \frac{12}{45}. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Dessa maneira, a probabilidade de salto no terceiro passo da caminhada, isto é, saindo de S_{k_2} e chegando a S_{k_3} , é:

$$\begin{aligned} P_{S_{k_3}, S_{k_2}}^{(\beta, 3)}(3) &= \left(\frac{P(A)}{Z_{A, k_2}^{(\beta, 3)}(3)} + \frac{P(D)}{Z_{D, k_2}^{(\beta, 3)}(3)} \right) e^{-\beta E(D_{k_2}^{(1)})} \\ &+ \left(\frac{P(B)}{Z_{B, k_2}^{(\beta, 3)}(3)} + \frac{P(E)}{Z_{E, k_2}^{(\beta, 3)}(3)} \right) e^{-\beta E(D_{k_2}^{(2)})} \\ &+ \left(\frac{P(C)}{Z_{C, k_2}^{(\beta, 3)}(3)} + \frac{P(F)}{Z_{F, k_2}^{(\beta, 3)}(3)} \right) e^{-\beta E(D_{k_2}^{(3)})}, \\ P_{S_{k_3}, S_{k_2}}^{(\beta, 3)}(3) &= \left(\frac{4}{45 Z_{A, k_2}^{(\beta, 3)}(3)} + \frac{8}{45 Z_{D, k_2}^{(\beta, 3)}(3)} \right) e^{-\beta E(D_{k_2}^{(1)})} \\ &+ \left(\frac{5}{45 Z_{B, k_2}^{(\beta, 3)}(3)} + \frac{10}{45 Z_{E, k_2}^{(\beta, 3)}(3)} \right) e^{-\beta E(D_{k_2}^{(2)})} \\ &+ \left(\frac{6}{45 Z_{C, k_2}^{(\beta, 3)}(3)} + \frac{12}{45 Z_{F, k_2}^{(\beta, 3)}(3)} \right) e^{-\beta E(D_{k_2}^{(3)})}, \end{aligned} \quad (3.39)$$

observe que novamente separamos os coeficientes de normalização em $Z_{A, k_2}^{(\beta, 3)}(3)$, $Z_{B, k_2}^{(\beta, 3)}(3)$, $Z_{C, k_2}^{(\beta, 3)}(3)$, $Z_{D, k_2}^{(\beta, 3)}(3)$, $Z_{E, k_2}^{(\beta, 3)}(3)$ e $Z_{F, k_2}^{(\beta, 3)}(3)$, já que eles são diferentes para cada caminho realizado. Os próximos passos da caminhada seguem este mesmo raciocínio. Então escrevemos a probabilidade de salto entre sítios da caminhada, a partir de $t = 3$ como:

$$\begin{aligned}
P_{S_{k_t+1}, S_{k_t}}^{(\beta, 3)}(t) &= \left(\frac{4}{45 Z_{A, k_t}^{(\beta, 3)}(t)} + \frac{8}{45 Z_{D, k_t}^{(\beta, 3)}(t)} \right) e^{-\beta E(D_{k_t}^{(1)})} \\
&+ \left(\frac{5}{45 Z_{B, k_t}^{(\beta, 3)}(t)} + \frac{10}{45 Z_{E, k_t}^{(\beta, 3)}(t)} \right) e^{-\beta E(D_{k_t}^{(2)})} \\
&+ \left(\frac{6}{45 Z_{C, k_t}^{(\beta, 3)}(t)} + \frac{12}{45 Z_{F, k_t}^{(\beta, 3)}(t)} \right) e^{-\beta E(D_{k_t}^{(3)})}, \quad (3.40)
\end{aligned}$$

As probabilidades das Eqs. (3.24), (3.34) e (3.40) foram calculadas considerando-se apenas uma configuração espacial dos sítios. Para avaliar este cálculo, será preciso calcular a média destas probabilidades sobre a desordem do meio. Propomos isso como um futuro trabalho.

Observando as probabilidades de saltos para $\mu = 1, 2$ e 3 , vemos que à medida que aumentamos a memória do caminhante, novos caminhos devem ser considerados e surgem diferentes coeficientes de normalização, aumentando a dificuldade de avaliação das probabilidades de salto. Isso porque, após o passo $t = \mu$, o caminhante pode saltar para um de seus μ primeiros vizinhos geométricos³, assim, o número de caminhos possíveis é $(\mu!)$ e existem $(\mu!)$ diferentes coeficientes de normalização. Sendo assim, a avaliação analítica das probabilidades de saltos se tornam extremamente difícil à medida que aumentamos a memória do caminhante.

Para prosseguirmos nosso estudo, a fim de encontrar a transição entre os regimes de exploração localizada e estendida dependente da temperatura do sistema e da memória do caminhante, no Cap. 4, implementamos a CET baseada no modelo analítico, usando o método Monte Carlo. A validação da implementação numérica, foi feita considerando os limites de alta e baixa temperaturas da CET apresentados neste capítulo.

³No entanto, como mostramos no Cap. 7, se todos os μ primeiros vizinhos geométricos estiverem na janela de sítios proibidos, no limite de baixa temperatura, o caminhante salta para seu $(\mu + 1)$ -ésimo vizinho geométrico. Neste caso, pode ou não acontecer revisita de um sítio da caminhada. Assim, a probabilidade de salto deve considerar a probabilidade dada pela Eq. (3.7), a probabilidade de Cox e a probabilidade de ocorrência ou não de revisita a um sítio já visitado.

4 *Implementação Computacional da Caminhada Estocástica do Turista*

A partir do modelo analítico apresentado no Capítulo 3, desenvolvemos o tratamento numérico, usando o método Monte Carlo, da caminhada estocástica do turista em sistemas unidimensionais. Desenvolvemos um algoritmo, em linguagem C++. Este algoritmo é dividido essencialmente em três partes:

1. Geração de Mapas: montagem de meios desordenados formados por sítios distribuídos por um processo de Poisson. Cada mapa é armazenado em uma Tabela de Coordenadas, de onde gera-se uma Matriz de Distâncias¹;
2. Cálculo das Tabelas: cálculo das exponenciais da probabilidade de salto $P_{j,i}^{(\beta,\mu)}$, usando função custo $E(D_{j,i}) = D_{j,i}$, e armazenamento das informações nas Tabelas de Exponenciais e de Referência²;
3. Realização da Caminhada Estocástica: para tomar decisões de saltos entre sítios, o algoritmo segue a probabilidade de salto $P_{j,i}^{(\beta,\mu)}$ e a regra de não retornar aos últimos μ sítios visitados³.

Este algoritmo foi validado pelos resultados analíticos nos limites de alta (Sec. 3.2.2) e baixa (Sec. 3.2.3) temperatura T . Para compreendermos a dinâmica da CET, nosso objetivo é calcular as densidades de sítios visitados sobre várias trajetórias, de tamanho N_p , realizadas por um caminhante em diferentes meios aleatórios. Em cada trajetória, contamos a quantidade de sítios distintos visitados pelo caminhante e dividimos pelo número de sítios do meio N . A densidade de sítios distintos visitados é importante, pois acreditamos encontrar uma transição na exploração do ambiente quando variamos, conjuntamente, T e μ . Além disso, queremos encontrar os valores de T , μ e N_p que permite otimizar a exploração do meio. Nossos resultados se encontram no próximo capítulo (Cap. 5).

¹Código-fonte no Apêndice A.1.

²Código-fonte no Apêndice A.1.

³Código-fonte no Apêndice A.2.

4.1 Geração de Mapas do Ambiente Aleatório

Para montar o meio aleatório (meio desordenado), consideramos um segmento de reta de comprimento unitário e distribuímos as coordenadas de N pontos usando a função *Ran2* apresentada no livro texto “Numerical Recipes”[36]. A Fig. 4.1 ilustra um meio com $N = 10$ pontos. A função *Ran2* fornece uma distribuição uniforme e independente das coordenadas dos pontos

Figura 4.1: Distribuição aleatória, uniforme e independente de $N = 10$ pontos sobre um segmento unitário de reta. Estes pontos representam os sítios da Tab. 4.1.

ao longo do segmento de reta. A Fig. 4.2(a) mostra que a distribuição de pontos pela função *Ran2* dentro do intervalo $(0,1)$ é uniforme para $N = 10^2, 10^3, 10^4$ e 10^5 , e à medida que aumentamos o número de pontos, as flutuações decrescem.

A distância entre pontos consecutivos, cujas coordenadas foram geradas por *Ran2*, segue uma distribuição exponencial com densidade N (Fig. 4.2(b)). Sendo assim, podemos dizer que a distribuição de pontos pela função *Ran2* segue um processo espacial de Poisson. Para mais detalhes sobre como caracterizar um processo de Poisson, veja a Sec. 2.2.

Cada ponto gerado dentro do intervalo $(0,1)$ é considerado um sítio num meio desordenado unidimensional de tamanho unitário. Os sítios são ordenados e rotulados de 0 à $N - 1$, para que o primeiro sítio seja S_0 , o segundo seja S_1 e assim por diante. Observe que somente em sistemas unidimensionais é possível fazer esta indexação ordenada. A configuração dos N sítios caracteriza um *mapa*.

As coordenadas dos sítios, definidas pela função *Ran2*, foram determinadas usando uma semente igual à *seed* = -3 para os testes iniciais. No entanto, para obter nossos resultados, precisamos calcular as médias das grandezas de interesse sobre a aleatoriedade das configurações de sítios. Para isso, é preciso realizar os cálculos destas grandezas sobre mapas diferentes. Assim, usamos sementes distintas, obtidas pelo algoritmo *Random32*, para gerar configurações diferentes de sítios. Para computadores com processador de 32 bits, este algoritmo gera números aleatórios inteiros de forma uniforme dentro do intervalo desejado. Para nossos estudos, usamos o intervalo $(-10^5, 0)$. O código-fonte em linguagem C++ deste algoritmo se encontra no Apêndice B.

As coordenadas de cada sítio são armazenadas numa *Tabela de Coordenadas* (TC), por exemplo, para $N = 10$ temos uma tabela semelhante à Tab. 4.1. De acordo com esta tabela, a

(a)

(b)

Figura 4.2: (a) Probabilidade de valores de coordenadas distribuídas pela função *Ran2* no intervalo (0,1) para $N = 10^2$, 10^3 , 10^4 e 10^5 pontos. (b) Distribuição de distâncias entre pontos consecutivos para $N = 20000$. O ajuste é dado pela Eq. (2.10).

Fig. 4.1 mostra o sítio S_0 na posição 0,1019 do segmento unitário de reta, o sítio S_1 em 0,1199, e assim por diante. Cada TC representa um mapa do meio desordenado.

Tabela 4.1: Tabela de coordenadas gerada para $N = 10$ sítios, veja Fig. 4.1.

Sítio	Coordenada
S_0	0,1019
S_1	0,1199
S_2	0,2315
S_3	0,2797
S_4	0,2899
S_5	0,3254
S_6	0,3886
S_7	0,6327
S_8	0,6553
S_9	0,7737

Com as coordenadas definidas pela TC, inicia-se o processo de cálculo das distâncias entre pares de sítios e a montagem da Matriz de Distâncias. Para nossos cálculos, usamos condições abertas contornos (CAC). Vale revisar que um sistema distribuído ao longo de um segmento de reta com CAC apresenta um começo numa extremidade e final na outra extremidade. Dessa maneira, um sítio, por exemplo o sítio S_0 da Tab. 4.1, posicionado no começo de uma das extremidades tem seu vizinho mais distante localizado no final deste segmento, no caso o sítio S_9 . Sendo x_i a coordenada do sítio S_i , e x_j a coordenada do sítio S_j , calculamos a distância euclidiana:

$$\Delta x = x_i - x_j, \quad (4.1)$$

$$\hat{D}_{i,j} = (\Delta x \Delta x)^{1/2}. \quad (4.2)$$

Usamos $(\Delta x \Delta x)$ ao invés de $(\Delta x)^2$, apenas por ser mais vantajoso computacionalmente. Este procedimento de multiplicação e calculamos a raiz quadrada porque nos interessa o módulo da diferença Δx . A expressão (4.2) fornece diretamente a distância para CAC.

Para manter a densidade de sítios constante, quando sistemas de tamanhos diferentes são comparados, normalizamos a distância euclidiana (4.2) dividindo-a pela separação média dos sítios ($\ell = 1/N$), dada pela Eq. (2.2), assim:

$$D_{i,j} = N \hat{D}_{i,j}. \quad (4.3)$$

As distâncias normalizadas são, então, armazenadas na *Matriz de Distâncias* (MD), que apresenta as propriedades:

1. tamanho $N \times N$: com as distâncias de todos os sítios a todos os sítios;
2. simetria: distância $D_{i,j} = D_{j,i}$,

3. diagonal principal nula: distância de uma sítio a ele mesmo é zero $D_{i,j} = 0$.

Esquemáticamente, uma MD apresenta-se como mostra a Tab. 4.2, sendo a primeira linha e primeira coluna os rótulos dos sítios. Assim, por exemplo, se percorrermos a linha do sítio S_2 (destacada), encontraremos as distâncias normalizadas do sítio S_2 a todos os outros sítios ($D_{2,0}, D_{2,1}, D_{2,2} = 0, \dots, D_{2,N-1}$). Para as coordenadas apresentadas na Tab. 4.1, a Tab. 4.3 ilustra a MD usando CAC. A MD é calculada para cada mapa gerado.

Tabela 4.2: Modelo padrão de uma matriz de distâncias.

	S_0	S_1	S_2	$\dots$	S_{N-1}
S_0	0	$D_{0,1}$	$D_{0,2}$	$\dots$	$D_{0,N-1}$
S_1	$D_{1,0}$	0	$D_{1,2}$	$\dots$	$D_{1,N-1}$
S_2	$D_{2,0}$	$D_{2,1}$	0	$\dots$	$D_{2,N-1}$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$
S_{N-1}	$D_{N-1,0}$	$D_{N-1,1}$	$D_{N-1,2}$	$\dots$	0

Tabela 4.3: Matriz de distâncias para os dados da Tab. 4.1 com condições abertas de contorno.

	S_0	S_1	S_2	S_3	S_4	S_5	S_6	S_7	S_8	S_9
S_0	0	0,0179	0,1295	0,1778	0,1880	0,2235	0,2867	0,5308	0,5534	0,6718
S_1	0,0179	0	0,1116	0,1598	0,1700	0,2055	0,2687	0,5129	0,5355	0,6538
S_2	0,1295	0,1116	0	0,0482	0,0584	0,0939	0,1571	0,4013	0,4239	0,5422
S_3	0,1778	0,1598	0,0482	0	0,0102	0,0457	0,1089	0,3531	0,3757	0,4940
S_4	0,1880	0,1700	0,0584	0,0102	0	0,0355	0,0987	0,3428	0,3655	0,4838
S_5	0,2235	0,2055	0,0939	0,0457	0,0355	0	0,0632	0,3074	0,3300	0,4483
S_6	0,2867	0,2687	0,1571	0,1089	0,0987	0,0632	0	0,2441	0,2667	0,3851
S_7	0,5308	0,5129	0,4013	0,3531	0,3428	0,3074	0,2441	0	0,0226	0,1409
S_8	0,5534	0,5355	0,4239	0,3757	0,3655	0,3300	0,2667	0,0226	0	0,1183
S_9	0,6718	0,6538	0,5422	0,4940	0,4838	0,4483	0,3851	0,1409	0,1183	0

4.2 Cálculo das Tabelas Usadas nas Tomadas de Decisão da Caminhada do Turista

A partir de cada MD, é calculada uma *Tabela de Exponenciais* (TE), que também é de tamanho $N \times N$. Primeiramente, o algoritmo lê os valores de β , inverso das temperaturas T que foram previamente atribuídas, de um arquivo chamado *beta.txt*. Então é realizado o cálculo:

$$E_{i,j} = e^{-\beta D_{i,j}}, \quad (4.4)$$

onde $E_{i,j}$ representa o elemento i, j da TE. Observe que o maior valor que pode ser obtido para esta expressão é $E_{i,i} = e^{-\beta D_{i,i}} = e^{-\beta 0} = 1$. Em seguida, cada linha da TE é ordenada de forma

crescente, o elemento de menor valor se encontra na primeira coluna e o elemento de maior valor está na última coluna. Para manter a correlação entre os sítios S_i e S_j , também montamos uma *Tabela de Referência*, em cujas células estão os rótulos dos sítios das exponenciais ordenadas. Para os $N = 10$ sítios da TC apresentada na Tab. 4.1, montamos as Tabelas TE 4.4 e TR 4.5 quando $\beta = 4$ ($T = 0,25$).

Tabela 4.4: Tabela de exponenciais gerada a partir da Tab. 4.5 para temperatura $T = 0,25$. Observe que o ordenamento é sobre cada linha individualmente e não dependente das demais linhas.

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
S_0	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	0,0001	0,0005	0,0008	0,0056	0,4879	1
S_1	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	0,0003	0,0011	0,0017	0,0115	0,4879	1
S_2	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	0,0019	0,0056	0,0115	0,0234	0,0966	0,1454	1
S_3	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	0,0008	0,0017	0,0128	0,1454	0,1607	0,6643	1
S_4	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	0,0005	0,0011	0,0193	0,0966	0,2419	0,6643	1
S_5	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	0,0001	0,0003	0,0234	0,0797	0,1607	0,2419	1
S_6	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	0,0001	0,0019	0,0128	0,0193	0,0797	1
S_7	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	0,0001	0,0036	0,4048	1
S_8	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	0,0088	0,4048	1
S_9	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	$< 10^{-4}$	0,0036	0,0088	1

Tabela 4.5: Tabela de Referência para a TE da Tab. 4.4.

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
S_0	S_9	S_8	S_7	S_6	S_5	S_4	S_3	S_2	S_1	S_0
S_1	S_9	S_8	S_7	S_6	S_5	S_4	S_3	S_2	S_0	S_1
S_2	S_9	S_8	S_7	S_6	S_0	S_1	S_5	S_4	S_3	S_2
S_3	S_9	S_8	S_7	S_0	S_1	S_6	S_2	S_5	S_4	S_3
S_4	S_9	S_8	S_7	S_0	S_1	S_6	S_2	S_5	S_3	S_4
S_5	S_9	S_8	S_7	S_0	S_1	S_2	S_6	S_3	S_4	S_5
S_6	S_9	S_0	S_1	S_8	S_7	S_2	S_3	S_4	S_5	S_6
S_7	S_0	S_1	S_2	S_3	S_4	S_5	S_6	S_9	S_8	S_7
S_8	S_0	S_1	S_2	S_3	S_4	S_5	S_6	S_9	S_7	S_8
S_9	S_0	S_1	S_2	S_3	S_4	S_5	S_6	S_7	S_8	S_9

Observe que 1 é o valor máximo e se encontra na última coluna para todas as linhas da Tab. 4.4. Como este valor se refere à distância de um sítio a ele mesmo, na última coluna da Tab. 4.5 têm-se os rótulos dos próprios sítios nas respectivas linhas.

4.3 Realização da Caminhada Estocástica

A caminhada estocástica se inicia no primeiro sítio de cada mapa, isso é, no sítio S_0 . A movimentação do caminhante é definida, a cada intervalo de tempo t , pela probabilidade de salto

saindo do sítio S_i e chegando ao sítio S_j , $P_{j,i}^{(\beta,\mu)}(t)$, dada pela Eq. (3.7), que, por conveniência, repetimos aqui, $P_{j,i}^{(\beta,\mu)}(t) = M_{j,j}^{(\mu)}(t)e^{-\beta E(D_{j,i})} / \sum_{k=1}^N M_{k,k}^{(\mu)}(t)e^{-\beta E(D_{k,i})}$, lembrando que $Z_i^{(\beta,\mu)}$ é o coeficiente de normalização, dado pela Eq. (3.5). Em nossa implementação, $M_{j,j}^{(\mu)}(t)$ é representado pelo vetor que contém os μ sítios proibidos de revisitação (janela de proibidos), e $e^{-\beta E(D_{j,i})}$ é dado pelas Tabelas TE. Assim, esta parte do algoritmo usa as tabelas TE e TR para calcular $P_{j,i}^{(\beta,\mu)}(t)$ a cada intervalo de tempo.

4.3.1 Procedimento para cálculo de $P_{j,i}^{(\beta,\mu)}$

Quando um caminhante se encontra no sítio S_i , para calcular a probabilidade de salto $P_{j,i}^{(\beta,\mu)}$, o algoritmo recupera a linha i , referente ao sítio S_i , das tabelas TE (Tab. 4.4) e TR (Tab 4.5) relacionadas a este sítio para o *vetor probabilidade* (VP) e *vetor referência* (VR), respectivamente. É nesta fase que são calculadas as probabilidades de sair de S_i e chegar a qualquer outro sítio S_j , inclusive a probabilidade de ficar em S_i , se $j = i$. Como a TE tem os elementos de suas linhas em ordem crescente, o resultado das probabilidades se encontrará num vetor ordenado.

Neste ponto, o algoritmo faz a verificação da janela proibida, definida pela memória μ . O programa procura no VR (linha i recuperada da tabela de Referência) rótulos de sítios que estejam na janela proibida. Caso sejam encontrados, as células correspondentes no VP são zeradas. Em seguida, o algoritmo calcula $Z_i^{(\beta,\mu)}$, ou seja, soma todos os elementos do VP, visto que as células correspondentes aos sítios proibidos estão nulas e a restrição do somatório está removida. Esta técnica evita que comparações desnecessárias sejam feitas, otimizando o tempo computacional. Cada elemento do VP é, então, dividido por $Z_i^{(\beta,\mu)}$. Com isso, os elementos do VP serão dados pela expressão (3.7).

Para ilustrar este passo do algoritmo, considere as Tabelas 4.4 e 4.5 (para $\beta = 4$), $i = 2$ e, apenas por simplicidade, $\mu = 0$. Neste caso, $Z_2^{(4,0)} = 1,2488$ e o algoritmo apresentará um VP e um VR como mostra a Tab. 4.6. Neste exemplo, $P_{9,2}^{(4,0)} = 0$, $P_{8,2}^{(4,0)} = 0$, $\dots$, $P_{2,2}^{(4,0)} = 0,7786$.

Tabela 4.6: Vetor Probabilidade e Vetor Referência para os valores das Tabs. 4.4 e 4.5.

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
S_2	0	0	0	0,0015	0,0044	0,0090	0,0182	0,0752	0,1132	0,7786

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
S_2	S_9	S_8	S_7	S_6	S_0	S_1	S_5	S_4	S_3	S_2

Com todas as probabilidades calculadas, montamos um *vetor probabilidade acumulada* (VA), em que cada elemento recebe seu próprio conteúdo acrescido do conteúdo do elemento

imediatamente anterior, chegando ao final com um elemento que soma todas as probabilidades anteriores. Dessa forma, como VP está normalizado, o último elemento do VA terá valor unitário, como mostra a Tab. 4.7. Para não ocupar muita memória RAM do computador e otimizar o programa, os vetores VP e VA correspondem ao mesmo vetor que é atualizado no decorrer do processamento.

Tabela 4.7: Vetor Probabilidade Acumulada para os valores da Tab. 4.6.

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
S_2	0	0	0	0,0015	0,0059	0,0149	0,0331	0,1083	0,2215	1

Em seguida, a função *Ran2*, novamente, nos fornece um valor entre 0 e 1, que chamamos de *lance*, que definirá o próximo sítio da caminhada. Varremos o VA até que seja satisfeita a condição:

$$\text{elemento do VA} \geq \text{lance},$$

então o rótulo do próximo sítio é definido pelo respectivo valor no VR. Assim, é realizado um passo da caminhada, isto é, o caminhante sai do sítio S_i e salta para o sítio definido por estes procedimentos. Em seguida, a janela de sítios proibidos é atualizada e um próximo passo é calculado, seguindo os mesmos procedimentos, até que se alcance o número máximo de passos N_p . Uma forma de visualizarmos como é feita a decisão de qual será o próximo sítio a ser

Figura 4.3: Probabilidade acumulada *versus* rótulo dos sítios. O valor do *lance* determina qual será o próximo sítio a ser visitado.

visitado é através do esquema da probabilidade acumulada, mostrada na Fig. 4.3. Vale lembrar que a função acumulada gerada pelo programa é discreta e não contínua como mostra o esquema da Fig. 4.3.

Abaixo, na Tab. 4.8, mostramos um exemplo de caminhada com $N_p = 20$ passos para memória $\mu = 2$ e para temperaturas 0,25 (com base nas Tabelas 4.4 e 4.5) e 0,50 (com base em tabelas omitidas).

Tabela 4.8: Trajetória de $t = 20$ passos realizada por um caminhante com memória $\mu = 2$, iniciada no sítio S_0 .

$T = 0,25$				$T = 0,50$			
Passo	Sítio	Passo	Sítio	Passo	Sítio	Passo	Sítio
1	S_0	11	S_5	1	S_0	11	S_5
2	S_1	12	S_4	2	S_1	12	S_7
3	S_2	13	S_3	3	S_9	13	S_6
4	S_3	14	S_5	4	S_3	14	S_5
5	S_4	15	S_4	5	S_5	15	S_3
6	S_5	16	S_3	6	S_8	16	S_6
7	S_3	17	S_5	7	S_4	17	S_7
8	S_5	18	S_4	8	S_2	18	S_5
9	S_4	19	S_3	9	S_7	19	S_6
10	S_3	20	S_5	10	S_8	20	S_8

Veja que para $T = 0,25$, após o passo $t = 7$ a trajetória entra num ciclo e o caminhante revisita apenas os sítios $S_3 \rightarrow S_5 \rightarrow S_4$, sem explorar todo o meio. Como é uma caminhada estocástica, aumentando o tempo de exploração N_p , o caminhante pode sair deste ciclo e continuar explorando o meio desordenado. Já para $T = 0,50$, após 13 passos, o caminhante já visitou todos os sítios e em 20 passos a trajetória não apresenta nenhum ciclo. Isso mostra que a dinâmica da CET pode apresentar uma transição entre os regimes de exploração localizada e estendida do meio, dependente de T , μ e N_p .

4.3.2 Validação do algoritmo

Para validarmos nossa implementação numérica, calculamos as probabilidades de saltos no limite de alta temperatura, e observamos as trajetórias no limite de baixa temperatura com memória $\mu = 0, 1, 2$ e 3 . Para alta temperatura ($T > 10^2$), comparamos os resultados de simulação com a Eq. (3.15). Para diferentes valores de memória, nosso algoritmo forneceu probabilidade de salto $P_{j,i}^{(0,1,\mu)} \approx 1/(N - \mu)$; após N_p passos, a probabilidade da trajetória foi $\tilde{P}_{S_j \leftarrow S_i}^{(N_p)} \approx (1/(N - \mu))^{N_p}$, que é equivalente à Eq. (3.15). Para baixa temperatura ($T \approx 10^{-2}$, para $N = 10^2$), observamos que realmente o caminhante salta para os vizinhos geométricos mais próximos, como assumimos na Seção 3.2.3.

Após a validação do algoritmo, demos início aos cálculos das densidades de sítios visitados sobre várias trajetórias. Usamos os valores de temperatura no intervalo $T = [0, 1; 4, 0]$, de memória no intervalo $\mu = [0, 20]$, número de sítios $N = \{64, 128\}$ do meio desordenado unidimensional e número de passos $N_p = \{10, 10^2, 10^3, 10^4\} \times N$. Além disso, deixamos o caminhante passear sobre 10^3 diferentes mapas, a fim de obtermos várias trajetórias independentes.

5 *Resultados Numéricos da Caminhada Estocástica do Turista*

Neste capítulo, reportamos os resultados numéricos obtidos a partir da implementação da Caminhada Estocástica do Turista, como mostrado no capítulo 4 desta dissertação. Os resultados foram obtidos ao deixarmos um caminhante, com memória μ e com agitação térmica T , andar N_p passos sobre um meio aleatório unidimensional com N sítios. A escolha do próximo sítio a ser visitado, em cada passo, é feita com base na Eq. (3.7), que, por conveniência, repetimos aqui, $P_{j,i}^{(\beta,\mu)} = e^{-\beta E(D_{j,i})} / Z_i^{(\beta,\mu)}$, lembrando que $\beta = 1/T$, $D_{j,i}$ é a distância euclidiana normalizada (Eq. (2.1)) entre o sítio S_i (onde se encontra o caminhante) e o sítio S_j (para onde o caminhante pretende saltar), e $Z_i^{(\beta,\mu)}$ é o coeficiente de normalização dado pela Eq. (3.5). Podemos destacar os principais resultados:

- Colapso dos dados numéricos, que implica em universalidade em sistemas fora-do-equilíbrio, como o problema da caminhada descrita aqui, a CET;
- Fator de correção para efeito de tamanho do meio desordenado e efeito de envelhecimento;
- Diagrama da transição entre os regimes de exploração localizada e estendida;
- Relação entre T , μ_c , N e N_p , que pode revelar a otimização máxima da exploração do ambiente.

Primeiramente, avaliamos a grandeza “número de sítios distintos visitados”. Em cada trajetória realizada pelo caminhante, contamos a quantidade de distintos sítios visitados. Analisamos esta grandeza para diferentes valores de temperatura T , memória μ e número de passos N_p . Na Fig. 5.1, mostramos como o número de sítios distintos visitados varia com T , μ e N_p . Observamos que o número de sítios visitados aumenta com o aumento da temperatura T , da memória μ e do número de passos N_p . A dependência da exploração do meio com o número de passos N_p sugere que a caminhada estocástica do turista apresente o efeito de envelhecimento. Para

cada valor de T e cada valor de N_p , esta grandeza apresenta uma transição entre regimes de exploração localizada (poucos sítios distintos visitados) e de exploração estendida (muitos sítios visitados). Este tipo de transição também é encontrado na Caminhada Determinista do Turista¹.

(a) $N_p = 10N$ passos.

(b) $N_p = 100N$ passos.

(c) $N_p = 1000N$ passos.

Figura 5.1: Sobre um mapa com $N = 128$ sítios, o turista realiza a caminhada estocástica para diferentes valores de N_p . Mostramos o número de sítios distintos visitados *versus* a memória do caminhante, para diferentes valores de T . Veja que o número de sítios visitados aumenta com o aumento de T , μ e N_p . Esta última dependência sugere que a caminhada estocástica do turista apresenta o efeito de envelhecimento. Dados numéricos obtidos sobre 10^3 trajetórias independentes, as barras em cada símbolo indicam o erro padrão.

O ponto de inflexão da curva “número de sítios distintos visitados” *versus* memória do caminhante nos fornece a memória crítica μ_c , na qual a transição entre os regimes localizado

¹Veja seção 2.3.3.

e estendido ocorre. Para encontrarmos esse ponto de inflexão, usamos a densidade ρ de sítios visitados, isto é, dividimos o número de sítios visitados pelo número de sítios N do meio desordenado, e ajustamos a curva pela expressão:

$$\rho = \frac{\rho_{min} - \rho_{max}}{1 + \exp[k(\mu - \mu_c)]} + \rho_{max}, \quad (5.1)$$

onde k é o fator de escala, ρ_{min} e ρ_{max} são os valores mínimo e máximo da densidade de sítios visitados, respectivamente. Nos experimentos numéricos, $\rho_{max} = 1$, ou seja, após certo valor de memória, o caminhante visita todos os sítios do meio desordenado, pelo menos uma vez.

Escolhemos a expressão da Eq. (5.1), pois apresenta ótimo ajuste aos dados numéricos, como mostra a Fig. 5.2. Tentamos fazer o ajuste dos dados numéricos usando outras expressões, como a tangente hiperbólica, mas não obtivemos bom resultado. Sendo assim, a Eq. (5.1) fornece, diretamente, o ponto de inflexão, ou seja, a memória crítica μ_c .

Figura 5.2: Densidade de sítios visitados ρ versus a memória μ para caminhadas com $N_p = 10N$ passos e temperaturas $T = 0,44; 0,50; 0,62; 0,75; 1,0$ e $1,5$. Os símbolos representam dados numéricos para $N = 128$ e as linhas são obtidas pelo ajuste usando a Eq. (5.1). Este ajuste fornece o ponto de inflexão da curva, que corresponde à memória crítica μ_c . Dados numéricos obtidos sobre 10^3 trajetórias independentes e barras em cada símbolo indicam o erro padrão.

Encontrar μ_c é importante, pois nossa intenção é compreender como a transição entre os regimes localizado e estendido depende da temperatura. Além disso, queremos saber como o tamanho do meio desordenado e o tempo de exploração influenciam esta transição. Sendo assim, analisamos a temperatura em função da memória crítica para os dados obtidos para $N = 128$ e $N_p/N = 10, 100$ e 1000 , como ilustrado na Fig. 5.3. Nesta figura, vemos que a relação entre temperatura e memória crítica é linear. Além do mais, à medida que aumentamos

Figura 5.3: Nesta figura temos a temperatura T versus a memória crítica μ_c . Quadrado e linha azul para $N_p/N = 10$, círculo e linha vermelha para $N_p/N = 100$ e triângulo e linha verde para $N_p/N = 1000$. Estas curvas sugerem que a medida que aumenta-se o número de passos, a curva $T \times \mu_c$ se aproxima da curva preta (Eq. (5.2)), que conecta os casos puramente determinístico ($T = 0 \Rightarrow \mu_c = 7$) e puramente estocástico ($\mu = 0 \Rightarrow T = 0,5$), induzindo-nos a procurar um colapso de dados.

o número N_p de passos a curva $T \times \mu_c$ se aproxima da curva dada pela Eq. (5.2):

$$\frac{T}{T_0} = 1 - \frac{\mu_c}{\mu_0}, \quad (5.2)$$

onde lembramos que T_0 é a temperatura de transição quando $\mu = 0$, e μ_0 é a memória crítica quando $T = 0$. Esta equação simplesmente conecta os casos:

- puramente determinista²: quando a temperatura é $T = 0$ e a memória crítica é $\mu_0 = \log_2 N$, neste caso $N = 128$ assim $\mu_0 = 7$;
- puramente estocástico³: caminhante com memória nula, $\mu = 0$, e temperatura de transição $T_0 = 1/2$.

A Eq. (5.2) também corresponde à hipótese de que à medida que aumentamos o tempo de exploração (N_p) do meio pelo caminhante, a curva que conecta os casos extremos $(0, T_0)$ e $(\mu_0, 0)$ da Caminhada do Turista é encontrada.

Figura 5.4: Procuramos um colapso de dados ajustando a temperatura T com uma temperatura escalada T_E e ajustando a memória crítica com uma memória escalada μ_E . As grandezas T_E e μ_E mostram dependência com N_p/N , como mostramos na Fig. 5.5. O colapso de dados é significativo e mostra que é possível encontrar uma expressão que envolva T , μ , N e N_p .

Para corroborar esta hipótese, precisamos de uma expressão mais geral, que dependa do número de passos, que se ajuste aos dados numéricos e que, quando extrapolada para o tempo máximo para ótima exploração, forneça a Eq. (5.2). Sendo assim, procuramos constantes que

²Veja seção 2.3.3 sobre a Caminhada Determinista do Turista.

³Veja seção 2.4.1 sobre Caminhada Estocástica do Turista (preguiçoso).

multiplicam T e μ_c , a fim de encontrar o colapso de $T \times \mu_c$ para os diferentes número de passos N_p . Multiplicamos a temperatura por uma temperatura escalada T_E em função de N_p/N e a memória crítica pela memória escalada μ_E , também em função de N_p/N . Para valores específicos de T_E e μ_E , obtemos o colapso de dados (Fig. 5.4) para os diferentes valores de número de passos N_p . Este colapso é significativo e mostra que podemos definir o diagrama da transição entre as regiões localizada e estendida, através de uma equação geral, em princípio, função das grandezas T , μ , N e N_p .

Figura 5.5: Os valores de T_E (quadrado) e μ_E (círculo) usados na Fig. 5.4 para ajustar temperatura e memória, respectivamente, em função de N_p/N , em escala log-log. As linhas são ajustes lineares e fornecem as Eqs. (5.3), linha preta, e (5.4), linha vermelha.

Plotamos os valores de T_E e μ_E usados para ajustar as curvas $T \times \mu_c$ (Fig. 5.4) em função de N_p/N , como mostra a Fig. 5.5. Na escala log-log, conseguimos encontrar as expressões:

$$T_E = \frac{1}{10} \left(\frac{N_p}{N} \right)^{5/18}, \quad (5.3)$$

$$\mu_E = \frac{3}{2} \left(\frac{N_p}{N} \right)^{-1/18}. \quad (5.4)$$

Veja que estas equações fornecem a relação $T_E \propto \mu_E^{-5}$. Agora, já que encontramos o colapso

Figura 5.6: Novamente plotamos $T \times \mu_c$, símbolos representam resultados numéricos e as linhas são dadas pela Eq. (5.6), que mostra a relação entre as grandezas T , μ_c , N e N_p , para $N_p/N = 10$ (azul), $N_p/N = 100$ (vermelha) e $N_p/N = 1000$ (verde). A linha cinza representa nossa hipótese e a linha rosa é dada pela Eq. (5.6) da extrapolação de N_p/N para 4000.

quando escrevemos:

$$\frac{T}{T_0} T_E = 1 - \frac{\mu_c}{\mu_0} \mu_E, \quad (5.5)$$

podemos escrever a expressão que separa as regiões localizada e estendida em função de T, μ, N e N_p :

$$\frac{T}{T_0} \frac{1}{10} \left(\frac{N_p}{N} \right)^{5/18} = 1 - \frac{\mu_c}{\mu_0} \frac{3}{2} \left(\frac{N_p}{N} \right)^{-1/18}. \quad (5.6)$$

Além do mais, podemos determinar a relação N_p/N que fornece nossa hipótese Eq. (5.2). Isso se dá quando $T_E = 1$ (ou $\mu_E = 1$). Assim:

$$\begin{aligned}
 T_E &= \frac{1}{10} \left(\frac{N_p}{N} \right)^{5/18} = 1 \\
 \left(\frac{N_p}{N} \right)^{5/18} &= 10 \\
 \frac{N_p}{N} &= 10^{18/5} \\
 \left(\frac{N_p}{N} \right)_{\max} &\approx 4000.
 \end{aligned} \tag{5.7}$$

Substituindo $N_p/N = 4000$ na Eq. (5.4), encontramos:

Figura 5.7: Temperatura *versus* memória crítica para $N = 64$. Símbolos representam resultados numéricos e as linhas são dadas pela Eq. (5.6) para $N_p/N = 10$ (azul), para $N_p/N = 100$ (vermelha) e para $N_p/N = 1000$ (verde). Linha cinza representa nossa hipótese e a linha rosa é dada pela Eq. (5.6) extrapolando N_p/N para 4000.

$$\begin{aligned}
 \mu_E &= \frac{3}{2} (4000)^{-1/18} \\
 \mu_E &\approx 1.
 \end{aligned} \tag{5.8}$$

Para conferir a validade da expressão dada pela Eq. (5.6), realizamos a caminhada estocástica do turista num meio com $N = 64$ sítios. Seguimos os mesmos procedimentos usados para $N = 128$ e $N_p/N = 10, 100, 1000$ e 4000 . As curvas e ajustes efetuados com a Eq. (5.6) são mostradas na Fig. 5.7. Esta figura mostra que a Eq. (5.6) se ajusta aos dados numéricos para diferentes valores de temperatura T , memória μ , tamanho do meio desordenado N e tempo de exploração N_p . Além disso, mostra que para $N_p/N = 4000$ a transição ocorre sobre a linha de transição dada por nossa hipótese (Eq. (5.2)).

Compreendemos o limite de tempo de exploração máximo (número máximo de passos) como o tempo que maximiza a otimização da exploração do ambiente. Em outras palavras, é o tempo mínimo que garante que o caminhante visite todos os sítios, pelo menos uma vez. Dessa forma, um caminhante com agitação térmica T e com memória μ_c que explora um meio desordenado de tamanho N por um tempo N_p , tem sua ótima performance quando T , μ_c , N e N_p estão relacionados pela Eq. (5.6) e quando o número máximo de passos é dado pela Eq. (5.7).

Dessa maneira, temos que a expressão (5.6) fornece o diagrama de transição entre os regimes de exploração localizada e estendida ilustrado na Fig. 5.8. Sua resolução é válida até o número máximo de passos do caminhante igual a 4000 vezes o tamanho do meio desordenado ($N_p = 4000N$).

Figura 5.8: Diagrama de transição entre os regimes de exploração localizada e estendida para a caminhada estocástica do turista em meios desordenados unidimensionais. Área azul representa o regime localizado. A linha de transição é dada pela Eq. (5.6), quando o número máximo de passos é dado pela Eq. (5.7).

6 *Conclusões*

Num meio unidimensional com N sítios distribuídos de forma aleatória, uniforme e independente, um caminhante realiza um passeio aleatório, de N_p passos, saltando de um sítio a outro, evitando os últimos μ sítios que se lembra de ter visitado, inclusive o sítio em que se encontra. A tomada de decisão de cada movimento do caminhante é feita com base numa função densidade de probabilidade (PDF) que privilegia saltos para sítios mais próximos. Essa PDF depende da temperatura T do meio desordenado e da memória μ do caminhante. A dinâmica desta caminhada aleatória parcialmente auto-repulsiva é descrita pela Caminhada Estocástica do Turista, que a $T = 0$ tem como caso limite uma caminhada determinista do turista.

As características do meio são importantes para o tipo de caminhada que consideramos. Para um meio desordenado unidimensional gerado a partir de uma distribuição espacial de Poisson (independência dos sítios), fizemos uma revisão de processos de Poisson no espaço, e detalhamos a estatística de classificação de vizinhança e a distribuição de distâncias entre sítios de k -ésima ordem de vizinhança.

Começamos esta dissertação com uma breve revisão dos resultados conhecidos da Caminhada Determinista do Turista (CDT) e da Caminhada Estocástica do Turista (CET). Na versão determinista da caminhada, CDT, a movimentação do caminhante é definida pela regra de saltar para o sítio mais próximo que não tenha sido visitado nos últimos μ passos da caminhada. A dinâmica desta CDT apresenta uma transição vítrea entre os regimes de exploração localizada e estendida do meio desordenado. Em meios unidimensionais, esta transição acontece num valor de memória crítica dada por $\mu = \log_2 N$.

Na CET, a movimentação do caminhante é dada pela PDF dependente da temperatura T e de uma função custo. Em meios unidimensionais, para uma função custo diretamente proporcional à distância entre os sítios, a dinâmica da CET mostrou uma transição do tipo vítrea, que ocorre numa determinada temperatura crítica. Para altos valores de temperatura, comparado com o valor da temperatura de transição, o caminhante visita todos os sítios, pelo menos uma vez, num comportamento de exploração estendida. Já, para valores baixos de temperatura, com relação à

temperatura crítica, a evolução do sistema apresenta uma dinâmica de envelhecimento, na qual, neste caso, o caminhante fica preso no regime de exploração localizada, mas continua visitando, ocasionalmente, alguns novos sítios do meio desordenado. A temperatura formal na qual ocorre a transição entre os regimes de exploração localizada e estendida foi encontrada tanto para $\mu = 0$ quanto para $\mu = 1$ e vale $T = 0.5$ [7, 8].

Nesta dissertação, examinamos a caminhada do turista em meios desordenados unidimensionais, variando conjuntamente a temperatura T e a memória μ do caminhante. Para esta abordagem, desenvolvemos um novo formalismo analítico a fim de estabelecer uma fórmula da PDF que depende das grandezas T e μ sem apresentar restrições devido à regra de não retornar aos últimos μ sítios visitados. Através do uso de matrizes de densidade, definimos os operadores memória, custo e densidade, que juntos descrevem o operador probabilidade de salto. Este operador fornece a PDF de salto entre sítios. Com esta PDF definida, passamos a descrever as probabilidades de saltos em várias situações.

No limite de alta temperatura, todos os sítios, que não estão na janela de sítios proibidos, apresentam a mesma probabilidade de serem visitados, ou seja, $P = 1/(N - \mu)$. Para $\mu = 0$, podemos afirmar que o sistema é ergódico, visto que, o caminhante pode ser encontrado em qualquer um dos sítios (o sistema se encontra em qualquer um de seus estados) com a mesma probabilidade, não há correlações de longo alcance e há independência das condições iniciais. Além disso, podemos afirmar que neste caso o sistema se encontra em equilíbrio, já que a probabilidade de saltar de um sítio S_i para um sítio S_j é a mesma probabilidade de voltar de S_j para S_i , isto é, o balanço detalhado é satisfeito na equação mestra.

No limite de baixa temperatura, foi necessário, primeiramente, definir uma nova classificação de vizinhança, que chamamos de vizinhança acessível de um sítio. Como a PDF de salto entre sítios favorece saltos para sítios mais próximos, um caminhante salta para o mais próximo sítio permitido, ou seja, para seu primeiro vizinho acessível. Dependendo da memória e do passo da trajetória em se o caminhante, o primeiro vizinho acessível de um sítio é o próprio sítio ou é o primeiro, segundo, ... ou μ -ésimo vizinho geométrico. Para caminhantes com $\mu = 0$, o primeiro vizinho acessível de um sítio é o próprio sítio, assim, a cada passo, o caminhante se mantém preso no mesmo sítio e, no limite de baixa temperatura, não explora todo o meio desordenado. Esta dinâmica também é encontrada na CDT com um caminhante preguiçoso. À medida que aumentamos a memória do caminhante, aumenta a exploração do meio desordenado pelo caminhante. No entanto, também aumenta a dificuldade em se determinar analiticamente a vizinhança geométrica do primeiro vizinho acessível, isto é, do próximo sítio a ser visitado. Da mesma forma, também se torna difícil encontrar as probabilidade de saltos consecutivos, já

que estas probabilidades são encontradas com a combinação das probabilidades de vizinhança geométrica, como mostrou a Sec. 3.2.3.

As probabilidades de saltos nos primeiros μ passos consecutivos de uma caminhada devem conter a probabilidade de vizinhança acessível, dada pela probabilidade de vizinhança geométrica obtida pela probabilidade de Cox, dos sítios da trajetória e a PDF que define a CET. Após o passo $t = \mu + 1$, as probabilidades de saltos podem ser encontradas considerando, além da PDF que define a CET e a probabilidade de Cox, a probabilidade de não ocorrer revisita de um sítio já visitado. A probabilidade de não ocorrer revisita é dada pela probabilidade complementar de ocorrer revisita, que, no limite de baixa temperatura, acontece quando o caminhante salta de um sítio para seu $(\mu + 1)$ -ésimo vizinho geométrico e a distância entre o sítio e seu $(\mu + 1)$ -ésimo vizinho é maior que a soma das distâncias entre o sítio e seus μ primeiros vizinhos. A probabilidade desta condição foi calculada usando a distribuição de distâncias entre sítios de k -ésima ordem de vizinhança e não apresenta dependência com o número N de sítios do meio desordenado. A partir desta condição, descremos a probabilidade de não ocorrer revisita, dada pela Eq. (7.10). Na CET, para analiticamente encontrarmos a transição entre os regimes de exploração do meio é necessário combinar as probabilidades das Eqs. (2.3), (3.7) e (7.10). Esta tarefa foi, então, proposta como um trabalho futuro.

No entanto, se considerarmos apenas a CDT, a probabilidade de não ocorrer revisita é dada pela Eq. (7.11), e revela um novo caminho para analiticamente demonstrar a probabilidade de atravessar um meio desordenado obtida numericamente em [23, 25], dada pela Eq. (2.23). Enfatizamos que este cálculo é um dos poucos resultados analíticos existente sobre a caminhada determinista do turista e deve ser explorado em maior profundidade.

Todo raciocínio analítico foi fundamental para desenvolvermos o tratamento numérico da CET usando o método Monte Carlo. O algoritmo numérico desenvolvido revelou que a dinâmica da CET apresenta uma transição entre os regimes de exploração localizada e estendida do meio e que esta transição é dependente de T , μ e N_p . Para compreendermos a dinâmica da CET, calculamos as densidades de sítios distintos visitados sobre várias trajetórias, de tamanho N_p , realizadas por um caminhante em diferentes meios desordenados.

A densidade de sítios distintos visitados mostrou-se uma grandeza importante, e permitiu relacionarmos as grandezas T , μ e N_p através de um colapso dos dados numéricos. O colapso de dados implica em universalidade. O problema da caminhada do turista é um caso de sistema fora-do-equilíbrio que apresenta universalidade, envidenciando que não só sistemas em equilíbrio termodinâmico podem apresentar universalidade.

A relação que obtivemos revela uma combinação de valores de T , μ e N_p que garantem que

o caminhante apresente ótima exploração do meio desordenado. Numericamente, compreendemos que um caminhante com memória μ que explora um meio desordenado com temperatura T e de tamanho N numa trajetória de N_p passos, tem sua ótima performance de exploração do meio quando T , μ , N e N_p estão relacionados pela Eq. (5.6) e quando o número máximo de passos é dado pela Eq. (5.7).

Por fim, nesta dissertação, o resultado fundamental é a obtenção da linha de transição entre os regimes localizado e estendido na caminhada aleatória parcialmente auto-repulsiva do turista. Acreditamos que escolhendo os valores de memória e temperatura compatíveis (sobre esta linha) obtemos o melhor compromisso entre a exploração do meio e a menor trajetória. Por esta razão, uma análise mais aprofundada desse problema em dimensionalidade maior pode ser de interesse na elaboração de um algoritmo de otimização.

7 *Perspectivas*

Neste capítulo, mostramos nossas perspectivas a fim de obter, analiticamente, a transição entre os regimes de exploração localizada e estendida, usando o formalismo apresentado no Cap. 3.

Lembrando que a probabilidade de sair do sítio S_i e chegar ao sítio S_j é dada pela Eq. (3.7), conjecturamos que seja possível encontrar a transição entre os regimes de exploração se também considerarmos a probabilidade de ocorrer ou não revisita de um sítio da caminhada. Um caminhante explora todo o meio desordenado se, em sua trajetória, visitar apenas sítios distintos. Com o objetivo de procurar a probabilidade do caminhante explorar o meio, visitando apenas sítios distintos, precisamos definir, em uma trajetória, a probabilidade de **não** ocorrer revisita de um sítio. Assim, para definirmos a probabilidade de uma caminhada sem revisita, começamos definindo a probabilidade de revisita.

Observamos também, que até agora, estivemos interessados no caso em que o número de passos do caminhante é maior que o número de sítios do meio desordenado ($N_p \gg N$). Aqui vamos considerar a situação inversa, a de tempos curtos ($N_p < N$).

Para $\mu = 0$, no limite de baixa temperatura ($\beta \rightarrow \infty$), o caminhante sempre revisita o mesmo sítio. Assim, vamos prosseguir com os casos $\mu \geq 1$. Numa trajetória, o caminhante sempre salta para um de seus μ primeiros vizinhos geométricos. Se, no passo t , todos os μ primeiros vizinhos já estiverem na janela de proibidos (conjunto $\mathbb{F}(t)$), então o caminhante salta para o $(\mu + 1)$ -ésimo vizinho geométrico. A probabilidade de um sítio ser o $(\mu + 1)$ -ésimo vizinho do sítio, onde se encontra o caminhante, é dada pela probabilidade de Cox (Eq. (2.3)). No entanto, para encontrar a probabilidade de um certo sítio ser $(\mu + 1)$ -ésimo vizinho de um sítio de interesse, devemos considerar que o sítio de interesse pode ter qualquer vizinhança a partir de seu $(\mu + 1)$ -ésimo vizinho, assim, como $I_1 = 1/2$, a Eq. (2.3) torna-se:

$$\sum_{n=\mu+1}^{\infty} P_{n,\mu+1}^{(1)} = \frac{2}{3} \sum_{n=\mu+1}^{\infty} \sum_{i=1}^{\mu+1} \text{Mult} \left(i-1, n-i, \mu+1-i; \frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3} \right). \quad (7.1)$$

Figura 7.1: Caminhada iniciada no sentido esquerda→direita, o sítio de interesse é S_k . Sítios cor-de-laranja são proibidos pela janela de memória $\mu = 4$. Na Fig. (a) acontece a revisita, ou seja, um salto no sentido direita→esquerda. Observe que, neste caso, $D_k^{(4)}$ é maior que a soma das outras distâncias. Isso não acontece na Fig. (b).

Quando o caminhante salta para seu $(\mu + 1)$ -ésimo vizinho, o caminhante pode revisar um sítio da caminhada (Fig. 7.1a) ou continuar a caminhada sem revisita (Fig. 7.1b). A revisita acontece sob a condição:

$$D_k^{(\mu+1)} > \Delta_D^{(\mu)}, \quad (7.2)$$

onde

$$\Delta_D^{(\mu)} = D_k^{(1)} + D_k^{(2)} + \dots + D_k^{(\mu)}, \quad (7.3)$$

ou seja, a distância entre o sítio S_k e seu $(\mu + 1)$ -ésimo vizinho é maior que a soma das distâncias entre o sítio S_k e seus μ primeiros vizinhos. A probabilidade da condição (7.2) é determinada pela PDF de distâncias de m -ésimos vizinhos¹. Uma vez que as distâncias são variáveis aleatórias que seguem a PDF $f_\ell^{(k)}(\delta)$ dada pela Eq. (2.13) (lembrando que $\ell = N^{-1}$), a soma destas μ distâncias também é uma variável aleatória (> 0). A PDF de $\Delta_D^{(\mu)}$ é, então, dada pela inversa da função característica:

$$h(\Delta_D^{(\mu)}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{\delta} e^{-i\Delta_D^{(\mu)}\tilde{\delta}} \tilde{h}(\tilde{\delta}), \quad (7.4)$$

onde a função característica da PDF da soma das distâncias vale:

$$\tilde{h}(\tilde{\delta}) = \prod_{k=1}^{\mu} \tilde{f}_\ell^{(k)}(\tilde{\delta}) = \left(1 - i\frac{2\tilde{\delta}}{\ell}\right)^{-(1+2+\dots+\mu)} = \left(1 - i\frac{2\tilde{\delta}}{\ell}\right)^{-\mu(\mu+1)/2}, \quad (7.5)$$

¹A PDF de distâncias de m -ésimos vizinhos está definida na Sec. 2.2.4.

sendo $\tilde{f}_\ell^{(k)}(\tilde{\delta})$ a função característica de $f_\ell^{(k)}(\delta)$ dada pela Eq. (2.19). Infelizmente não é possível obter analiticamente a integral das Eq. (7.4) com o produto das funções característica da Eq. (7.5):

$$h(\Delta_D^{(\mu)}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\tilde{\delta} e^{-i\Delta_D^{(\mu)}\tilde{\delta}} \left(1 - i\frac{2\tilde{\delta}}{\ell}\right)^{-\mu(\mu+1)/2}. \quad (7.6)$$

No entanto, usando a Eq. (2.14), podemos obter o valor médio de $\Delta_D^{(\mu)}$ dado pela Eq.(7.3):

$$\langle \Delta_D^{(\mu)} \rangle \approx (1 + 2 + \dots + \mu) \frac{\ell}{2} = \mu(\mu+1) \frac{\ell}{4}. \quad (7.7)$$

Podemos então nos perguntar, qual a probabilidade de revisita de um sítio. Esta probabilidade é dada por:

$$P\left(D_k^{(\mu+1)} > \Delta_D^{(\mu)}\right) \approx P\left(D_k^{(\mu+1)} > \langle \Delta_D^{(\mu)} \rangle\right) = P\left(D_k^{(\mu+1)} > \mu(\mu+1) \frac{\ell}{4}\right). \quad (7.8)$$

Mas, usando a Eq. (2.18),

$$\begin{aligned} P\left(D_k^{(\mu+1)} > \mu(\mu+1) \frac{\ell}{4}\right) &= 1 - F_\ell^{(k)}\left(\mu(\mu+1) \frac{\ell}{4}\right) \\ &= \frac{\Gamma(\mu+1, 2\mu(\mu+1) \frac{\ell}{4\ell})}{\Gamma(\mu+1)} \\ &= \frac{\Gamma(\mu+1, \frac{\mu(\mu+1)}{2})}{\Gamma(\mu+1)}. \end{aligned} \quad (7.9)$$

Observe que esta probabilidade fica independente do número de sítios do meio desordenado ($\ell = N^{-1}$) e depende somente da memória μ . Assim, a cada passo, a probabilidade de **não** ocorrer revisita é:

$$P_{(n\tilde{a}o-revisita)} = \left(\sum_{n=\mu+1}^{\infty} P_{n,\mu+1}^{(1)}\right) \left(1 - \frac{\Gamma(\mu+1, \frac{\mu(\mu+1)}{2})}{\Gamma(\mu+1)}\right), \quad (7.10)$$

onde o primeiro fator é dado pela Eq. (7.1).

Agora, para encontrarmos uma expressão, que relacione as grandezas T , μ e N_p e mostre a transição entre os regimes exploratórios, acreditamos ser necessário escrever a probabilidade de uma trajetória de N_p passos sem revisita. Para definir esta probabilidade, deve-se considerar o efeito de borda, ou seja, as probabilidades de saltos nos primeiros μ passos da caminhada, já que o caminhante obrigatoriamente não revisita nenhum sítio. A partir do passo $t = \mu + 1$, o caminhante pode saltar para o primeiro, segundo, ..., μ -ésimo ou $(\mu + 1)$ -ésimo vizinho geométrico e, além disso, pode ou não ocorrer revisita. Para isso, é necessário combinar as probabilidades das Eqs. (2.3), (3.7) e (7.10), que se mostrou uma tarefa especialmente complicada, e a propomos como um trabalho futuro.

No entanto, se considerarmos um caminhante com memória μ passeando em um meio desordenado com temperatura nula, isto é, considerando a caminhada determinista do turista, a probabilidade de **não** haver revisita em N_p passos, ou seja, apenas novos sítios são visitados, é dada por:

$$P(N_p|\mu) = \left(1 - \frac{\Gamma(\mu+1, \frac{\mu(\mu+1)}{2})}{\Gamma(\mu+1)}\right)^{N_p - (\mu+1)}. \quad (7.11)$$

Lembrando que pode ocorrer revisita somente após o passo $t = \mu + 1$ de uma caminhada, e que estamos considerando $N \geq N_p$. Compare esta expressão com a Eq. (2.23). Através de um raciocínio diferente, encontramos a probabilidade de uma trajetória sem revisita semelhante à probabilidade de um caminhante atravessar um meio de tamanho N_p . A Fig. 7.2 mostra que a Eq. (7.11) também tem a forma de uma sigmóide. A transição entre os comportamentos desta

Figura 7.2: Representação gráfica da Eq. (7.11) para $N = 2^2, 2^6, 2^{10}, 2^{14}$ e 2^{18} . É possível notar que numa pequena largura de memória ocorre uma abrupta mudança no comportamento das curvas quando $\mu_c = \sqrt{\log_2 N_p} + 1$.

expressão ocorre quando a memória crítica é dada por:

$$\mu_c = \sqrt{\log_2 N_p} + 1. \quad (7.12)$$

As diferenças entre as Eqs. (2.23) e (7.11) são (i) para a primeira, a transição ocorre na memória crítica $\mu_c = \log_2 N_p$, para a segunda, a transição ocorre em $\mu_c = \sqrt{\log_2 N_p} + 1$; (ii) na primeira, a largura da transição é independente de N_p ($\epsilon = e/\ln 2$), na segunda, a largura

diminui à medida que N_p aumenta. Analisando estas diferenças, vemos que a probabilidade de não ocorrer revisita dada pela Eq. (7.11) revela um caminho analítico para demonstrar a probabilidade de atravessar um meio desordenado dada pela Eq. (2.23), obtida numericamente em [23, 25]. Enfatiza-se que este cálculo é um dos poucos resultados analíticos existente sobre a caminhada determinista do turista e sugerimos que seja explorado em maior profundidade.

APÊNDICE A – Algoritmo da Caminhada do Turista em C++

A.1 Código-fonte para a geração do meio desordenado e das tabelas

Código usado para gerar mapas de meios desordenados através de uma processo espacial de Poisson. Cada mapa é armazenado em uma Tabela de Coordenadas, de onde gera-se uma Matriz de Distâncias. A partir da Matriz de Distâncias, o algoritmo calcula as exponenciais da probabilidade de salto $P_{j,i}^{(\beta,\mu)}$, usando função custo $E(D_{j,i}) = D_{j,i}$, e armazena das informações nas Tabelas de Exponenciais e de Referência;

```

/*****
/*                                     Geração de mapas e tabelas                                     */
*****/

/* DECLARAÇÃO DAS BIBLIOTECAS */
#include <iostream>
#include <math.h>
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <cstdio>
#include <new>
#include "ran2.cpp"           // Função RAN2
#include "salvar.cpp"         // Funções para salvar matrizes em arquivos TXT
using namespace std;         // para o uso de algumas funções (cin, cout, min)

//-----/
/* DECLARAÇÃO DAS VARIÁVEIS */
long int seed,               // semente para o Ran2
    dim,                     // dimensionalidade do sistema
    n,                       // tamanho do sistema
    mi,                      // memória do caminhante
    pmax,                    // número de passos
    mapamax,                 // número de mapas
    max,                     // número máximo de memória
    * tabela_referencia,     // tabela de referencia

```

```

    * caminhada,          // trajetoria da caminhada
    * visitados;          // janela com os mi últimos sítios visitados

double temperatura,
    * coordenadas,        // coordenadas dos sítios
    * distancias,         // distancia de um sítio a todos os outros
    * matriz_distancia,   // matriz de distancias
    * tabela_exponencial; // tabela de exponenciais

//-----/
/* PROTÓTIPO DAS FUNÇÕES */
void Distribuicao_Uniforme(long int linha, long int coluna, double *ptr_coord);
void Distancia(long int i, long int linha, long int coluna, double *ptr_coord, double *ptr_dist);

//-----/
/* FUNÇÃO PRINCIPAL */
int main() {
    long int a, b, i, j, k, mapa, aux_int, tamanho_v; // contadores
    double aux, argumento, lance;
    bool visitado = false;
    FILE *arq_entrada, *arq_entrada2, *arq_saida;
    char nome_arquivo[20];

    // Leitura dos dados a partir de arquivo com dados iniciais
    arq_entrada = fopen ("Data.txt", "r");
    fscanf(arq_entrada, "%d\n%d\n%d\n%d\n%d", &n, &dim, &pmax, &mapamax, &max);
    fclose(arq_entrada);

    // Loop do MAPA
    arq_entrada = fopen ("seed_32.txt", "r");
    for (mapa=0; mapa<mapamax; mapa++){
        fscanf(arq_entrada, "%d\n", &seed); // semente para este mapa
        // Montando ambiente-----
        coordenadas = new (nothrow) double[n];
        distancias = new (nothrow) double[n];
        matriz_distancia = new (nothrow) double[n*n];
        Distribuicao_Uniforme(n, dim, &coordenadas[0]);
        for (i = 0; i < n; ++i){ //Ordernar coordenadas - APENAS PARA 1 DIMENSÃO
            aux = 0.0;
            for (j = 0; j < n; ++j)
                if (coordenadas[i] < coordenadas[j]){
                    aux = coordenadas[i];
                    coordenadas[i] = coordenadas[j];
                    coordenadas[j] = aux;
                }
        }
        for (i = 0; i < n; ++i){
            Distancia(i, n, dim, &coordenadas[0], &distancias[0]);
            for (j = i; j < n; ++j) // usando a propriedade de matriz simetrica
                matriz_distancia[i*n+j] = matriz_distancia[j*n+i]=distancias[j];
        }
        delete[] coordenadas;
        delete[] distancias;
    }
}

```

```

// Montando Temperatura-----
tabela_exponencial = new (nothrow) double[n*n];
tabela_referencia = new (nothrow) long int[n*n];
// Leitura das temperaturas a partir de arquivo-----
arq_entrada2 = fopen ("temp.txt", "r");
while (!feof(arq_entrada2)) {
    fscanf(arq_entrada2, "%lf\n", &temperatura);
    // Calculando os exponenciais e preenchendo a referencia
    for(i=0; i<n; i++) for(j=0; j<n; j++){
        argumento = -n*matriz_distancia[j*n+i]/temperatura;
        tabela_exponencial[j*n+i] = exp(argumento);
        tabela_referencia[j*n+i] = j;
    }
    // Bubble Sort
    for (i=0; i<n; i++){
        aux = 0.0;
        for(a=(n-1); a>0 ; a--) for(b=0; b<a; b++)
            if (tabela_exponencial[b*n+i]>tabela_exponencial[(b+1)*n+i]){
                aux = tabela_exponencial[b*n+i];
                tabela_exponencial[b*n+i] = tabela_exponencial[(b+1)*n+i];
                tabela_exponencial[(b+1)*n+i] = aux;
                aux_int = tabela_referencia[b*n+i];
                tabela_referencia[b*n+i] = tabela_referencia[(b+1)*n+i];
                tabela_referencia[(b+1)*n+i] = aux_int;
            }
    }
    Grava_matriz_double(n,n,&tabela_exponencial[0],'E',temperatura,mapa); // E de exponencial
    Grava_matriz_int(n,n,&tabela_referencia[0],'M',temperatura,mapa); // M de referencia
}
fclose (arq_entrada2);
delete[] matriz_distancia;
delete[] tabela_exponencial;
delete[] tabela_referencia;
}
fclose (arq_entrada);
return 0;
}

// Distribuição uniforme dos pontos-----
void Distribuicao_Uniforme(long int linha, long int coluna, double *ptr_coord) {
    long int i, j;
    for ( i = 0; i < linha; ++i) // Preenche cada uma das dimensões
        for( j = 0; j < coluna; ++j ) ptr_coord[j*linha+i] = double(ran2(&seed));
}

// Distancia de um sítio à todos os outros-----
void Distancia(long int i, long int linha, long int coluna, double *ptr_coord, double *ptr_dist){
    long int j, k;
    double soma, dx;
    soma = 0.0;
    for (j = 0; j < linha; ++j) {
        if (j == i) ptr_dist[j] = 0.0; // distancia de um sítio a ele mesmo
        else {
            soma = 0.0;

```

```

        for (k = 0; k < coluna; ++k){
            dx = fabs(ptr_coord[k*linha+i] - ptr_coord[k*linha+j]); // valor absoluto
            soma += dx*dx;
        }
        ptr_dist[j] = sqrt(soma);      // distancia entre Si e Sj
    }
}
}

```

A.2 Código-fonte para as tomadas de decisão da caminhada estocástica do turista

Nesta seção mostramos como nosso algoritmo realiza a caminhada estocástica do turista, para tomar decisões de saltos entre sítios, o algoritmo segue a probabilidade de salto $P_{j,i}^{(\beta,\mu)}$ e a regra de não retornar aos últimos μ sítios visitados.

```

/*****
/*          Realização da Caminhada Estocástica do Turista          */
*****/

// Mesmas bibliotecas e variáveis do código acima.

//-----/
/* PROTÓTIPO DAS FUNÇÕES */
long int Joga_Roleta(double lance, long int linha, long int t, long int indice);

//-----/
/* PRINCIPAL */
int main() {
    long int a, b, i, j, k, mapa, aux_int, tamanho_v, linha, coluna, indice;
    double aux, argumento, lance;
    bool visitado = false;
    FILE *arq_entrada, *arq_entrada2, *arq_entrada3, *arq_saida;
    char nome_arquivo[20], nome_arquivo1[20];

    // Leitura dos dados a partir de arquivo com dados iniciais
    arq_entrada = fopen ("Data.txt", "r");
    fscanf(arq_entrada, "%d\n%d\n%d\n%d\n%d", &n, &dim, &pmax, &mapamax, &max);
    fclose(arq_entrada);

    // Loop do MAPA
    arq_entrada = fopen ("seed_32.txt", "r");
    for (mapa=0; mapa<mapamax; mapa++){
        fscanf(arq_entrada, "%d\n", &seed);
        tabela_exponencial = new (nothrow) double[n*n];
        tabela_referencia = new (nothrow) long int[n*n];
        caminhada = new (nothrow) long int[pmax];
        visitados = new (nothrow) long int[max]; // janela com os mi últimos sítios visitados
        // Leitura das temperaturas a partir de arquivo-----

```

```

    arq_entrada2 = fopen ("temp.txt", "r");
    while (!feof(arq_entrada2)) {
        fscanf(arq_entrada2, "%lf\n", &temperatura);
        // Leitura da tabela exponencial a partir de arquivo-----
        sprintf(nome_arquivo1, "MFOut_E_%1.4f_m_%d.txt", temperatura, mapa);
        arq_entrada3 = fopen (nome_arquivo1, "r");
        fscanf(arq_entrada3, "%d\n%d\n", &linha, &coluna);
        for (i = 0; i < linha; ++i) {
            fscanf(arq_entrada3, "\n%d\t", &indice);
            for (j = 0; j < coluna; ++j)
                fscanf(arq_entrada3, "%lf\t", &tabela_exponencial[j*linha+i]);
        } fclose(arq_entrada3); remove(nome_arquivo1);
        // Leitura da tabela referencia a partir de arquivo-----
        sprintf(nome_arquivo1, "MIOut_M_%1.4f_m_%d.txt", temperatura, mapa);
        arq_entrada3 = fopen (nome_arquivo1, "r");
        fscanf(arq_entrada3, "%d\n%d\n", &linha, &coluna);
        for (i = 0; i < linha; ++i) {
            fscanf(arq_entrada3, "\n%d\t", &indice);
            for (j = 0; j < coluna; ++j)
                fscanf(arq_entrada3, "%d\t", &tabela_referencia[j*linha+i]);
        } fclose(arq_entrada3); remove(nome_arquivo1);

        // Caminhando -----
        for (mi = 0; mi < max; ++mi){
            for (k = 0; k <= mi; ++k) visitados[k] = 0;
            for (k = 0; k < pmax; ++k) caminhada[k] = 0;
            visitados[0] = caminhada[0] = 0; // inicia a caminhada no sítio 0
            tamanho_v = 1;
            visitacao = 1;
            for (j = 1; j < pmax; ++j) {
                lance = double(ran2(&seed));
                // Encontrando o próximo sítio a ser visitado -----
                if (mi > 0) {
                    caminhada[j] = Joga_Roleta(lance, caminhada[j-1], tamanho_v, j);
                    if (j < mi) {
                        tamanho_v++; // tamanho do vetor visitados
                        visitados[j] = caminhada[j];
                    } else {
                        tamanho_v = mi;
                        for (k = 0; k < (tamanho_v-1); ++k) visitados[k] = visitados[k+1];
                        visitados[tamanho_v-1] = caminhada[j];
                    }
                } else caminhada[j] = Joga_Roleta(lance, caminhada[j-1], 0, j);
                for (k = 0; k < j; ++k){
                    if (caminhada[j] == caminhada[k]){
                        visitado = true;
                        break;
                    } else visitado = false;
                }
                if (!visitado) visitacao++; // Contando o numero de sítios distintos visitados
            }
            // Salvando resultados em arquivo
            sprintf(nome_arquivo, "Out_%d_%1.2lf_m_%d.txt", mi, temperatura, mapa);
            arq_saida = fopen(nome_arquivo, "w");

```

```

        fprintf(arq_saida, "%1.8lf \t %d \n", temperatura, visitacao);
        fclose(arq_saida);
    }
}
fclose (arq_entrada2);
delete[] matriz_distancia;
delete[] tabela_exponencial;
delete[] tabela_referencia;
delete[] caminhada;
delete[] visitados;
}
fclose (arq_entrada);
return 0;
}

// Função Jogar a Roleta-----
long int Joga_Roleta(double lance, long int linha, long int t, long int indice){
    long int i, j, proximo;
    double *p_acumulada;
    double normaliza = 0.0;
    p_acumulada = new (nothrow) double[n];

    // Calculando as probabilidade de sair de "i" indo para "j", excluindo os sítios visitados
    for (i = 1; i < n; ++i) p_acumulada[i] = 0.0;
    for (i = 0; i < n; ++i) p_acumulada[i] = tabela_exponencial[i*n+linha];
    for (i = 0; i < t; ++i) for (j = 0; j < n; ++j)
        if (visitados[i] == tabela_referencia[j*n+linha]){
            p_acumulada[j] = 0.0;
            break;
        }
    for (i = 0; i < n; ++i) normaliza += p_acumulada[i];
    for (i = 0; i < n; ++i) p_acumulada[i] /= normaliza;
    for (i = 1; i < n; ++i) p_acumulada[i] += p_acumulada[i-1];
    // Escolhendo o mais provável vizinho
    for (i = 0; i < n; ++i){
        if (p_acumulada[i] >= lance){
            proximo = tabela_referencia[i*n+linha];
            break;
        }
    }
    delete[] p_acumulada;
    return proximo;
}

```

APÊNDICE B – Algoritmo Random32 em C++

Para gerar as sementes usadas pelo *Ran2*, usamos o algoritmo Random32 que, para computadores com processador de 32 bits, gera números inteiros aleatórios de forma uniforme dentro do intervalo desejado. Para nossos estudos, usamos o intervalo $(10^5; 0)$.

```
#include<stdio.h>
#include<math.h>

#define MAXNUM 4294967295.

long unsigned r, mult;
double rn;
FILE *fp;

int main(){
    fp = fopen("`seed32.txt'", "`w'"); // arquivo com os números gerados

    r = 9892311;
    mult = 16807; // para processadores de 32-bit
    for(int i=1; i<=100000; i++){
        r *= mult;
        rn = (double)r/MAXNUM;
        fprintf(fp, "`%f\n'", (-rn*100000));
    }
}
```


Referências

- [1] R. Metzler and J. Klafter, “The random walk’s guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach,” *Phys. Rep.*, vol. 339, pp. 1–77, 2000.
- [2] B. Derrida, “From random walks to spin glasses,” *Physica D*, vol. 107, pp. 186–198, September 1997.
- [3] G. F. Lima, A. S. Martinez, and O. Kinouchi, “Deterministic walks in random media,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 87, p. 010603, Jun 2001.
- [4] H. E. Stanley and S. V. Buldyrev, “Statistical physics - the salesman and the tourist,” *Nature (London)*, vol. 413, pp. 373–374, 27 September 2001.
- [5] C. A. S. Terçariol, *Caminhadas Deterministas no limite de alta dimensionalidade*. PhD thesis, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto - SP, Dezembro 2008.
- [6] R. S. González, “Difusão anômala: Transição entre os regimes localizado e estendido na caminhada do turista,” Master’s thesis, Université de São Paulo, Ribeirão Preto, 2005.
- [7] A. S. Martinez, O. Kinouchi, and S. Risau-Gusman, “Exploratory behavior, trap models, and glass transitions,” *Phys. Rev. E*, vol. 69, no. 1, p. 017101, 2004.
- [8] S. Risau-Gusman, A. S. Martinez, and O. Kinouchi, “Escaping from cycles through a glass transition,” *Phys. Rev. E*, vol. 68, p. 016104, Jul 2003.
- [9] A. B. A. Barrat and R. Pastor-Satorras, “Glass transition and random walks on complex energy landscapes,” *Phys. Rev. E*, vol. 80, p. 020102, 2009.
- [10] J.-P. Bouchaud, “Weak ergodicity breaking and aging in disordered-systems,” *J. Phys. I (France)*, vol. 2, pp. 1705–1713, September 1992.
- [11] P. J. Clark and F. C. Evans, “On some aspects of spatial pattern in biological populations,” *Science*, vol. 121, pp. 397–398, March 1955.
- [12] P. J. Clark, “Grouping in spatial distributions,” *Science*, vol. 123, pp. 373–374, September 1956.
- [13] M. F. Dacey, “Proportion of reflexive n th-order neighbours in a spatial distribution,” *Geographical Analysis*, vol. 1, pp. 385–388, 1969.
- [14] T. F. Cox, “Reflexive nearest neighbours,” *Biometrics*, vol. 37, pp. 367–369, June 1981.
- [15] C. A. S. Terçariol, F. de M. Kiipper, and A. S. Martinez, “An analytical calculation of neighbourhood order probabilities for high dimensional poissonian processes and mean field models,” *J. Phys. A*, vol. 40, no. 9, pp. 1981–1989, 2007.

- [16] M. Abramowitz and I. A. Stegun, eds., *Handbook of Mathematical Functions*. New York: Dover Publications, 1972.
- [17] A. C. Aitken, *Statistical mathematics*. New York: Interscience publishers, 6th edition ed., 1949.
- [18] R. S. Liptser, *Statistics of random processes*. New York: Springer, 2001.
- [19] D. R. Cox, *Point processes*. London, New York: Chapman and Hall, 1980.
- [20] C. A. S. Terçariol and A. S. Martinez, “Analytical results for the statistical distribution related to a memoryless deterministic walk: Dimensionality effect and mean-field models,” *Phys. Rev. E*, vol. 72, no. 2, p. 021103, 2005.
- [21] A. S. M. André Ricardo Backes, Wesley Nunes Gonçalves and O. M. Bruno, “Texture analysis and classification using deterministic tourist walk,” *Pattern Recognition*, aceito para publicação 2009.
- [22] O. Kinouchi, A. S. Martinez, G. F. Lima, G. M. Lourenço, and S. Risau-Gusman, “Deterministic walks in random networks: an application to thesaurus graphs,” *Physica A*, vol. 315, pp. 665–676, December 2002.
- [23] C. A. S. Terçariol, R. S. Gonzalez, and A. S. Martinez, “Analytical calculation for the percolation crossover in deterministic partially self-avoiding walks in one-dimensional random media,” *Phys. Rev. E*, vol. 75, no. 6, p. 061117, 2007.
- [24] C. A. S. Terçariol and A. S. Martinez, “The influence of memory in deterministic walks in random media: analytical calculation within a mean field approximation,” *Phys. Rev. E*, vol. 78, no. 7, p. 031111, 2008.
- [25] C. A. S. Terçariol, R. S. Gonzalez, W. T. R. Oliveira, and A. S. Martinez, “Deterministic and random partially self-avoiding walks in random media,” *Physica A*, pp. 678–680, 2007.
- [26] J. M. Berbert, R. S. González, and A. S. Martinez, “Stochastic touristic walk: analytical approaches, algorithm and numerical results,” *Journal of Computational Interdisciplinary Sciences*, vol. 1, no. 1, p. 33, 2008.
- [27] G. M. Viswanathan, V. Afanasyev, S. Buldyrev, E. J. Murphy, P. A. Prince, and H. E. Stanley, “Lévy flight search patterns of wandering albatrosses,” *Nature (London)*, vol. 381, pp. 413–415, May 1996.
- [28] G. M. Viswanathan, S. Buldyrev, S. Havlin, M. G. E. da Luz, E. P. Raposol, and H. E. Stanley, “Optimizing the success of random searches,” *Nature (London)*, vol. 401, pp. 911–914, October 1999.
- [29] J. C. Dyre, “Energy master equation: a low-temperature approximation to Bassler’s random-walk model,” *Phys. Rev. B*, vol. 51, pp. 12276–12294, 1 May 1995.
- [30] C. Monthus and J.-P. Bouchaud, “Models of traps and glass phenomenology,” *J. Phys. A*, vol. 29, pp. 3847–3869, July 1996.

- [31] B. Rinn, P. Maass, and J.-P. Bouchaud, “Hopping in the glass configuration space: subaging and generalized scaling laws,” *Phys. Rev. B*, vol. 64, p. 104417, 1 September 2001.
- [32] E. M. Bertin and J. P. Bouchaud, “Subdiffusion and localization in the one-dimensional trap model,” *Phys. Rev. E*, vol. 67, p. 026128, February 2003.
- [33] R. A. Denny, D. R. Reichman., and J.-P. Bouchaud, “Trap models and slow dynamics in supercooled liquids,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 90, p. 025503, January 2003.
- [34] T. J. Arruda, R. S. González, C. A. S. Terçariol, and A. S. Martinez, “Arithmetical and geometrical means of generalized logarithmic and exponential functions: generalized sum and product operators,” *Phys. Lett. A*, vol. 372, pp. 2578–2582, 2008.
- [35] A. S. Martinez, R. S. González, and C. A. S. Terçariol, “Continuous growth models in terms of generalized logarithm and exponential functions,” *Physica A*, vol. 387, no. 23, pp. 5679–5687, 2008.
- [36] W. T. V. William H. Press, Saul A. Teukolsky and B. P. Flannery, *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, New York, second ed., 1992.

Anexo I

Journal of Computational Interdisciplinary Sciences (2008) 1(1): 33-39
© 2008 Pan-American Association of Computational Interdisciplinary Sciences
ISSN 1983-8409
<http://epacis.org>

Stochastic touristic walk: analytical approaches, algorithm and numerical results

Juliana Militão Berbert¹, Rodrigo Silva González² and Alexandre Souto Martinez³

Manuscript received on September 23, 2008 / accepted on November 10, 2008

ABSTRACT

Consider N points randomly and uniformly distributed in a d -dimensional hypercube. A walker explores this disordered medium going to the nearest site, which has not been visited in the last μ (memory) steps. The walker trajectory is composed of a transient part and a periodic part (cycles). In this case, travelers can or cannot explore all available space, given rise to a crossover at critical memory, for one-dimensional systems $\mu_1 = \ln_2 N$, between localized and extended regimes. The deterministic rule can be softened to consider more realistic situations with the inclusion of a stochastic parameter T (temperature). In this case, the walker movement is defined by a probability density function (PDF) that is parameterized by T and a cost function, which increases as the distance among sites increases. As the temperature increases, the walker can escape from cycles and extend the exploration. Here we review the analytical results obtained for a system with arbitrary dimensionality d for $\mu = 0$ and one-dimensional systems with $\mu = 1$. Also we suggest an extension of this system to study the influence of the temperature on the critical memory.

Keywords: stochastic walk, deterministic walk, non-Markovian processes, glass transition.

Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Avenida Bandeirantes, 3.900, 14040-901 Ribeirão Preto, SP, Brazil.

¹E-mail: bjuliana@usp.br

²E-mail: rsgonzalez@pg.fclrp.usp.br

³E-mail: asmartinez@usp.br

1 INTRODUCTION

Random walks and stochastic techniques have become nearly ubiquitous in science and engineering, specially in studies of natural phenomena. The random walks have had their origin in the analysis of the particles movement in fluids, as a dust particle over a water drop. One can observe the employment of the random walks implemented over a regular lattice or on disordered systems. A classical example is the Travelling Salesman Problem (TSP), where a walker (salesman) knows *a priori* the location of all sites (cities) in a disordered landscape. This salesman starts his walk in a given city and must visit all other cities once and return to the first one through the shortest path.

Being a non-polynomial (NP) hard problem, analytical and numerical studies are notably complicated. Nowadays, the most common numerical methods used to deal with this problem are simulated annealing and genetic algorithm. Although these methods are consolidated, they spend several computational effort. So, alternative methods, which reduces the computational effort, are desirable.

Lima et al. [1], in 2001, have introduced a new way to explore disordered systems, with a deterministic walker which moves having memory μ . The walk was recognized as "Tourist Walk" (TW) [2] and, due to its memory, it is partially self-avoiding. Differently of TSP, in TW, the walker have to know only local information to guarantee a good exploration. Following the deterministic rule of going to the nearest site which has not been visited in the last μ steps, it has been found that even with low memory the walker may explore the whole system. The minimal memory that enable an extended exploration in one-dimensional systems is the critical memory $\mu_1 = \ln_2 N$. A stochastic version of this walk were investigated by Martinez et al. [3] on systems with arbitrary dimensionality d and walker with $\mu = 0$. Risau-Gusman et al. [4] have examined this stochastic walk over one-dimensional systems and walker with $\mu = 1$. In both cases a glass transition has been found. This article shows a review of the analytical results obtained by [3] and [4] in the Section 2. Besides, numerical results for one-dimensional systems and walkers with $\mu \geq 0$ are shown in Section 3.

2 STOCHASTIC TOURIST WALK

The stochastic tourist walk (STW) is a generalization of the deterministic tourist walk (DTW) [1], to comprehend more realistic situations. Consider a random walk on a disordered landscape composed of N sites representing, for example, localized feeding sites as flowers, trees, water holes, islands, etc [3]. The disor-

dered medium can be defined with each site coordinate, $x_i^{(k)}$, $i = 1, 2, \dots, N$ and $k = 1, 2, \dots, d$, being drawn in accordance with a random and uniform distribution along the unitary edges in a d -dimensional hypercube. To hop from one site to another, the walker uses a strategy based in some arbitrary cost function $E(D_{j,i})$, which is a monotonically increasing function of the normalized Euclidean distance $D_{j,i}$ between sites i and j . To normalize the distance between any two sites, one can divide this distance by the mean separation of the system sites. One can geometrically realize the mean site separation, if imagine a d -dimensional hypercube with length edges equal L delimiting a system with N sites. To each site one has to associate an also d -dimensional hypercube with length edges given by the mean site separation ℓ . Now, if these hypercubes do not overlap, then we may write $N\ell^d = L^d \Rightarrow \ell = LN^{-1/d}$. Thus, the normalized Euclidean distance is

$$D_{j,i} = \frac{N^{1/d}}{L} \left\{ \sum_{k=1}^d [x_i^{(k)} - x_j^{(k)}]^2 \right\}^{1/2}. \quad (1)$$

In the thermodynamical limit, $N \rightarrow \infty$, this procedure preserves the constant site density as the system dimensionality varies, and makes it possible to compare systems with distinct dimensionalities.

To move on this landscape, the walker strategy based in the cost function $E(D_{j,i})$ follows a probability density function (PDF) that depends on the inverse of the formal temperature, $T > 0$, and the walker memory, $\mu \geq 0$. The inverse of a formal temperature T is the stochastic parameter $\beta = 1/T$ and as β decreases, long hops are favored. The memory generates a self-avoiding window with the last μ visited sites, which are forbidden to revisitation in the next μ steps. Thus, the PDF is given by:

$$W_{j \leftarrow i} = \frac{e^{-\beta E(D_{j,i})}}{\sum_{k=1}^{N'} e^{-\beta E(D_{k,i})}}, \quad (2)$$

the summation $\sum'$ excludes the forbidden sites by μ . The denominator is known by normalization coefficient $Z_i^{(\beta, \mu)}$.

It is interesting to note that this probability privileges local exploration when $T \rightarrow 0$ ($\beta \rightarrow \infty$) and for $T = 0$ the DTW is recovered. Now, when $T \rightarrow \infty$ ($\beta \rightarrow 0$) the walker can visit all permitted sites with the same probability $W_{j \leftarrow i} = 1/(N - \mu)$, for any allowed j . Thus, in which T and μ one can expect the transition, between these localized and extended explorations, takes place?

In the following we show that a glass transition occurs at a sharp critical temperature for a specific cost function in a system

with arbitrary dimensionality and $\mu = 0$. Also, we stress the difficulties in the analytical calculations in one-dimensional systems but now with $\mu = 1$. Finally we present our preliminary numerical results for one-dimensional systems when both temperature and memory vary.

2.1 Lazy Tourist in Systems with Arbitrary Dimensionality: Glass Transition

Martinez et al. [3] have analyzed stochastic walkers with memory $\mu = 0$ moving on d -dimensional systems. This study focuses on a surprising connection between two apparently disparate fields: models of exploratory behavior [5, 6] and the statistical physics of glass transitions described by trap models [7, 8, 9, 10, 11, 12]. They show that a glass transition may appear when a walker explores a random landscape with localized resources. This exploration depends on a well-defined manner of the cost function $E(D_{j,i})$ used to weigh the possible movements.

For each system dimension d , there is one specific cost function that enables a glass transition between the localized and extended exploratory behavior. The order parameter is the mean residence time $\langle t_r(\beta) \rangle$, i.e., the mean time that the walker spends on a site. Although any site has a finite trapping time, the average residence time $\langle t_r \rangle$ diverges below a finite stochasticity level T_d . In this case, the system falls into an out-of-equilibrium regime and aging phenomena appear.

To compute $\langle t_r(\beta) \rangle$, one may consider discrete time steps. The probability of a walker to remain in a given site a is

$$p_a(\beta) \equiv W_{a \leftarrow a} = \frac{1}{Z_a^{(\beta,0)}}$$

and the probability that the walker leaves site a is $q_a(\beta) = 1 - p_a(\beta)$. Calculations become easier if the distances are relabeled according to the ordering with respect site a , so that the nearest neighbor of site a is at $D_1^{(a)}$, the second nearest neighbor is at $D_2^{(a)}$ and so forth. Then, the normalization coefficient may be written as

$$Z_a^{(\beta,0)} = 1 + \exp[-\beta E(D_1^{(a)})] \sum_{j=1}^{N-1} \exp[-\beta \Delta_j^{(a)}],$$

where $\Delta_j^{(a)} = E(D_j^{(a)}) - E(D_1^{(a)})$.

Given that at $t = 0$, the walker is at site a , the probability the walker remains there till time t and leaves this site at $t + 1$ is given by the geometric distribution (the first failure after t successes): $P_\beta(t) = p_a^t(\beta) q_a(\beta)$. The residence (trapping) time

associated to site a is defined as the expected time:

$$\begin{aligned} t_r^{(a)}(\beta) &= \sum_{t=0}^{\infty} t p_a^t(\beta) q_a(\beta) = \frac{p_a(\beta)}{[1 - p_a(\beta)]} \\ &= \exp[\beta E(D_1^{(a)})] \left\{ 1 + \sum_{j=2}^{N-1} \exp[-\beta \Delta_j^{(a)}] \right\}. \end{aligned} \quad (3)$$

The mean residence time for one realization of site distribution is $t_r(\beta) = \sum_{a=1}^N t_r^{(a)}(\beta)/N$ and the average over the disorder leads to

$$\begin{aligned} \langle t_r(\beta) \rangle &= \int dD_1 \dots dD_{N-1} P(D_1, \dots, D_{N-1}) \\ &\times \frac{t_1(\beta)}{1 + \sum_{j=2}^{N-1} e^{-\beta \Delta_j}}, \end{aligned} \quad (4)$$

where $t_1(\beta) \equiv e^{\beta E(D_1)}$.

To calculate $\langle t_r(\beta) \rangle$, one needs to average over the full probability density distribution of neighbor distances $P(D_1, \dots, D_{N-1})$. This task is quite difficult since it takes the boundaries into account. Therefore, to remove the dependence on the boundaries one takes the thermodynamical limit $N \rightarrow \infty$. Although one cannot factorize the joint probability of the ordered distances ($D_1 < D_2 < \dots < D_N$), to continue the calculation one can make an approximation by considering only the effect on the trapping time of hops to the first neighbor. Here, we emphasize that this choice is due to two reasons:

1. the memory allows hops to the first neighbors, even the last visited one; and
2. in the limit of low temperature ($\beta \rightarrow \infty$) the movements to nearest sites are greatly favored.

Thus, $\Delta_{N-1} > \dots > \Delta_2 > E(D_1)$ and the term $\sum_{j=2}^{N-1} e^{-\beta \Delta_j} \ll 1$ may be neglected in Eq. 4 and only the nearest neighbor distance PDF $P(D_1)$ is relevant, so that:

$$\langle t_r(\beta) \rangle \cong \langle t_1(\beta) \rangle = \int_0^\infty dD_1 P(D_1) e^{\beta E(D_1)}. \quad (5)$$

It is possible to show numerically that $t_1(\beta)$ diverges with the same exponent and at the same β as the exact $t_r(\beta)$ [3]. For a spatial Poisson process, the first neighbor probability density function is simply: $P(D_1) = S_d(D_1) e^{-V_d(D_1)}$, where we call the attention that $V_d(R) = A_d R^d$ is the volume of a hypersphere of radius R and $S_d(R) = A_d d R^{d-1}$ is its surface. The geometrical factor $A_d = \pi^{d/2} / \Gamma(d/2 + 1)$ is the volume

of an unitary radius hypersphere and $\Gamma(z)$ is the gamma function. Thus,

$$\langle t_1(\beta) \rangle = A_d d \int_0^\infty dD_1 D_1^{d-1} e^{\beta E(D_1) - A_d D_1^d}. \quad (6)$$

Let us now focus our discussion on the cost function $E(D)$. If one considers D being a distance, then one must expect that $E(D)$ is a monotonically increasing function of D , since the longer the distance, the more expensive to cover the trajectory. There are several ways that a function be a monotonically increasing function of its argument, for instance it can be a power law or exponential, or a generalized function that includes this situation [13]. In these cases the function increases indefinitely, nevertheless there are situations where the function increases up to a maximum value. Examples of this situation are the cumulative function (of probability density functions) in probability theory. Again, these functions can be subdivided in two categories, the ones which present an inflection point and others which do not present an inflection point. For instance, see the review of these functions presented in the context of population dynamics (or growth) models [14].

To continue, we choose the power-law form for the cost function: $E(D_{j,i}) = D_{j,i}^\alpha$, where α is an adjustable exponent. For different values of α different behaviors can be examined:

- $\alpha < d$: the $\langle t_1(\beta) \rangle$ is finite for any β value, so that, for long times, the system is subdiffusive.
- $\alpha > d$: the $\langle t_1(\beta) \rangle$ is always divergent and the system is superdiffusive.
- $\alpha = d$: the more interesting situation appears, the residence time and the tail of the first neighbor distance distribution compete and a glass transition appears at finite value of β :

$$\langle t_1(\beta) \rangle = \begin{cases} 1/(1 - \beta/A_d) & (\beta < A_d) \\ \infty & (\beta \geq A_d) \end{cases} \quad (7)$$

In this case, the mean residence time is finite only for $\beta < A_d$ and diverges at $\beta_d = A_d$, namely, until β assumes the volume of a unitary hypersphere in d -dimensions the walker can explore the medium, after that the system enters in a non-equilibrium regime and aging phenomena emerge.

The residence time PDF as function of β shows a power-law tail and a glass transition appears when the cost function

$E(D_{j,i}) = D_{j,i}^d$ is used. Notice however that these results arise from the particular distribution of sites used (Poisson process) and a power law cost function. We call the attention of our readers that other scenarios can be envisaged. For instance, when correlation is introduced among the sites. Further, future studies should consider other possibilities of cost functions, such as the generalized ones, which would bring more richness to the parameter space. For example, a distribution of sites where the distance PDF has a power-law tail.

These studies reveal us that a glass transition appears when the walker has no memory. Below, we see analytical results when the walker is prohibited to remain in the same site ($W_{a \leftarrow a} = 0$), that is, walker has memory $\mu = 1$.

2.2 Memoryless Tourist in One-dimensional Systems

Let us now consider that the walker has memory $\mu = 1$. Thus the walker cannot remain in the same site, and hops to one of its n neighboring sites with a hop probability that depends on the distance $D_{j,i}$ between sites i and j according to a cost function $E(D_{j,i})$. To examine this particular STW, Risau-Gusman et al. [4] have described the disordered landscape on a graph with ordered neighborhood. Then, all N sites represent N connected nodes and the probability of hops $W_{j \leftarrow i}$ provides a weight of the link between nodes i and j . When hops occur in this graph, the network structure forms a directed graph. So, this graph presents interesting sets of nodes that we call sinks (i.e., sets with sites without outgoing links to sites outside the set), and sources (i.e., sets with sites without incoming links from sites outside the set).

The walk dynamics shows that for low temperature, the walker always goes to the nearest neighbor, eventually being trapped in a two-cycle when a pair of reciprocally nearest neighbors is found. We call this pair of mutually nearest neighbors of couples. The couples play the role of sites in the $\mu = 0$ situation. However, for $T > 0$, the two-cycles are no longer stable and can be characterized by a distribution of trapping times $P(t_r)$. From this distribution, one can compute the mean trapping time in two-cycles using the joint distributions of distances for the spatial Poisson process.

Consider a cost function that permits a glass transition in this sites configuration. As discussed previously, an interesting cost function for one-dimensional systems is a linear function $E(D_{j,i}) = D_{j,i}$, since it may give rise to a crossover between different exploration regimes.

As in the preceding section, we order the distance according to couples. Now, let a and b be the sites of a couple,

$D_0 = D_{b,a}$ their pair distance, and $D_{j,a}(D_{j,b})$ the distance from $a(b)$ to its $(j + 1)$ th nearest neighbor. We can write the probability of hop from a to b and *vice versa* using (2):

$$W_{b \leftarrow a} = \frac{e^{-\beta D_0}}{Z_a^{(\beta,1)}}, \quad W_{a \leftarrow b} = \frac{e^{-\beta D_0}}{Z_b^{(\beta,1)}}.$$

Notice that these probabilities in general are different, since the passage seen from site a is different from the one seen from site b .

Suppose that at $t = 0$ the walker is at site a . The probability that the walker remains inside the couple for t steps and then leaves it is $P_e(t) = (p_a p_b)^{t/2} q_a$, for even values of t and

$$P_o(t) = (p_a p_b)^{(t-1)/2} p_a q_b$$

for odd values of t , with

$$q_a = 1 - p_a \quad \text{and} \quad q_b = 1 - p_b.$$

Since the walk may start either at site a or site b , the probabilities that the walker remains in the couple up to time t are $P_e(t)$ and $P_o(t)$. The expected residence time for this couple is:

$$t_r = \frac{p_a p_b + (p_a + p_b)/2}{1 - p_a p_b}. \quad (8)$$

Since one needs to include the bounds into account in order to obtain its characteristic diverging behavior, it is not possible to obtain $\langle t_r(\beta) \rangle$ through a straight forward analytical calculation. The strategy is to calculate in two extreme cases, which are physically intuitive and study their divergence. In the limit of low temperature, an approximation is the symmetrical approach where the distance from both members of the couple to their second neighbor is very larger and one can assume that this distance are equal for both sites a and b ; and the normalization coefficient are equal too ($Z_a^{(\beta,1)} = Z_b^{(\beta,1)}$). Another approximation, in this limit, is the asymmetrical approach, where the distance $D_{1,a}$ is different from the distance $D_{1,b}$. Supposing that $D_{1,b} \gg D_0$, then the walker cannot leave the couple from site b .

From these approximations, the average residence time assume finite values when $\beta < \beta_1 = 2$, and diverges when $\beta = \beta_1 = 2$. Therefore, the system shows the behavior ergodic for high temperature ($\beta < \beta_1$) and non-ergodic for low temperature, when $\beta \geq \beta_1$.

The critical temperature obtained here is the same as in the $\mu = 0$ situation. One can understand this noticing that most of the $2/3$ of the N points form couple (mutually nearest neighbors) [15, 16] so that one can neglect the effect of $1/3$ of the

N that form the transient in DTW. Considering one the couples ($2N/3$ points) and now counting each time step as two moves (time renormalization) one obtain the same situation for $\mu = 1$ as $\mu = 0$, what explains the fact that both systems have the same critical temperature (the details are irrelevant).

What makes much more difficult to deal with $\mu \geq 2$ in STW is that in the deterministic case, the system does not present a characteristic cycle period, but a whole spectrum [17], which inhibits time renormalization as done in the $\mu = 1$ case.

3 ONE DIMENSIONAL SYSTEMS AND ARBITRARY MEMORY VALUES

The previous section describes the STW and reveals that one may find a glass transition at a critical temperature for $\mu = 0$ in arbitrary system dimension or $\mu = 1$ in one-dimensional systems. Now, we attempt to understand the effect of memory in the critical temperature. Before treating the problem analytically, we have implemented the STW algorithm in a computer and run it in a computer cluster. Our first numerical results for one-dimensional systems show the change in the system behavior when glass transition occurs.

3.1 Algorithm

On a unitary segment line, N sites coordinates are independent and identically distributed (i.i.d.). The distance matrix ($D_{N \times N}$) is then computed using the normalized Euclidean distance among all pairs of sites i and j . In this case, the mean site separation is $\ell = 1/N$. To obtain the probability table, we have used the same cost function that enabled the glass transition in Section 2, $E(D_{j,i}) = D_{j,i}^d$, for one-dimensional system $d = 1$. Several tables have been calculated for different temperature values ranging from 0.20 to 50.0 at different temperature steps.

With open boundary conditions (OBC) several walks have been performed with memory varying from 0 to 25. Since we hold that when the walker is able to visit all sites then his exploration is extended and the system display an ergodic behavior. For fixed number of walker steps, our goal was observe in which bandwidth of T and μ the mean visitation rate of distinct sites changes radically. Thus, at each walker step, if a non-visited site were visited, then the mean visitation rate was incremented.

3.2 Numerical Results

In this way, our results show that for low temperatures, the mean visitation rate of distinct sites changes in a bandwidth of μ near the critical memory (μ_1), as in DTW. As one can behold in

Figure 1 – Mean visitation rate of distinct sites *versus* memory, for ten temperatures. One can notice that the mean rate behavior drastically changes as the temperature increases.

the Figure 1, as the temperature increases, the dependence with memory decreases.

We can conclude that for one-dimensional systems, the STW exhibits dependence with memory until the system reaches the critical temperature, after that the dependence with memory vanishes.

4 CONCLUSIONS

These results lead us to hold that this problem exhibits two distinct regimes: non-ergodic, where the walker can be trapped in localized exploration; and ergodic, where the walker can explore the whole medium. For instance, if a walker wants to find unvisited feeding sites, he needs to extend his exploration of the landscape. We conjecture that the efficiency of this kind of exploration is maximized when the cost function allows a glass transition. Then, the optimal exploratory process may occur at some temperature and walker memory above the glass line transition. Through simulations, we have already concluded that for one-dimensional systems, the STW exhibits dependence with memory until the system reaches a critical temperature, after that the dependence

with memory is vanished. Future works deal with analytical studies about the system behavior as we take on different temperatures and memory for 1-dimensional systems and numerical studies for systems with high dimensionalities.

ACKNOWLEDGEMENTS

RSG(140420/2007-0), JMB(134461/2007-0) and ASM(303990/2007-4 and 476862/2007-8) acknowledges the Brazilian agency CNPq for support.

REFERENCES

- [1] LIMA GF, MARTINEZ AS & KINOUCI O. 2001. Deterministic Walks in Random Media. *Phys. Rev. Lett.*, 87: 010603.
- [2] STANLEY HE & BULDYREV SV. 2001. Statistical physics – The salesman and the tourist. *Nature (London)*, 413: 373–374.
- [3] MARTINEZ AS, KINOUCI O & RISAU-GUSMAN S. 2004. Exploratory behavior, trap models, and glass transitions. *Phys. Rev. E*, 69: 017101.
- [4] RISAU-GUSMAN S, MARTINEZ AS & KINOUCI O. 2003. Escaping from cycles through a glass transition. *Phys. Rev. E*, 68: 016104.

- [5] VISWANATHAN GM, AFANASYEV V, BULDYREV S, MURPHY EJ, PRINCE PA & STANLEY HE. 1996. Lévy flight search patterns of wandering albatrosses. *Nature* (London), 381: 413–415.
- [6] VISWANATHAN GM, BULDYREV S, HAVLIN S, DA LUZ MGE, RAPOSOL EP & STANLEY HE. 1999. Optimizing the success of random searches. *Nature* (London), 401: 911–914.
- [7] BOUCHAUD J-P. 1992. Weak ergodicity breaking and aging in disordered-systems. *J. Phys. I* (France), 2: 1705–1713.
- [8] DYRE JC. 1995. Energy master equation: a low-temperature approximation to Bassler's random-walk model. *Phys. Rev. B*, 51: 12276–12294.
- [9] MONTHUS C & BOUCHAUD J-P. 1996. Models of traps and glass phenomenology. *J. Phys. A*, 29: 3847–3869.
- [10] RINN B, MAASS P & BOUCHAUD J-P. 2001. Hopping in the glass configuration space: subaging and generalized scaling laws. *Phys. Rev. B*, 64: 104417.
- [11] BERTIN EM & BOUCHAUD J-P. 2003. Subdiffusion and localization in the one-dimensional trap model. *Phys. Rev. E*, 67: 026128.
- [12] DENNY RA, REICHMAN DR & BOUCHAUD J-P. 2003. Trap models and slow dynamics in supercooled liquids. *Phys. Rev. Lett.*, 90: 025503.
- [13] ARRUDA TJ, GONZÁLEZ RS, TERÇARIOL CAS & MARTINEZ AS. 2008. Arithmetical and geometrical means of generalized logarithmic and exponential functions: generalized sum and product operators. *Phys. Lett. A*, 372: 2578–2582.
- [14] MARTINEZ AS, GONZÁLEZ RS & TERÇARIOL CAS. 2008. Continuous growth models in terms of generalized logarithm and exponential functions. *Physica A*, 387: 5679–5687.
- [15] KINOUCI O, MARTINEZ AS, LIMA GF, LOURENÇO GM & RISAU-GUSMAN S. 2002. Deterministic walks in random networks: an application to thesaurus graphs. *Physica A*, 315: 665–676.
- [16] TERÇARIOL CAS & MARTINEZ AS. 2005. Analytical results for the statistical distribution related to a memoryless deterministic walk: Dimensionality effect and mean-field models. *Phys. Rev. E*, 72: 021103.
- [17] TERÇARIOL CAS & MARTINEZ AS. 2008. The influence of memory in deterministic walks in random media: analytical calculation within a mean field approximation. *Phys. Rev. E*, 78: 031111.

Anexo II

Journal of Computational Interdisciplinary Sciences (2009) 1(2): 119-125
© 2009 Pan-American Association of Computational Interdisciplinary Sciences
ISSN 1983-8409
<http://epacis.org>

Deterministic tourist walk

Rodrigo Silva González¹, Juliana Militão Berbert¹, César Augusto Sangaletti Terçariol²,
Wilnice Tavares Reis Oliveira¹ and Alexandre Souto Martinez³

Manuscript received on November 4, 2008 / accepted on January 8, 2009

ABSTRACT

A set of N points is randomly spread in a d -dimensional hypercube of unitary edges. The neighborhood statistics among any pair of points is known as the "random point problem" (RPP). A walker can move over these points following the deterministic rule of going, at each time step, to the nearest site not visited in the previous μ steps. This partially self-avoiding walk is known as "deterministic tourist walk" (DTW). Here we present some results on the RPP and on dynamic aspects of the DTW.

Keywords: tourist walks, disordered media, partially self-avoiding walks.

Correspondence to: Alexandre Souto Martinez

¹Departamento de Física e Matemática (DFM), Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Avenida Bandeirantes, 3900, 14040-901 Ribeirão Preto, SP, Brazil. E-mails: rsgonzalez@pg.ffclrp.usp.br / bjuliana@usp.br / wilnice@pg.ffclrp.usp.br

²Centro Universitário Barão de Mauá, rua Ramos de Azevedo, 423, 14090-180 Ribeirão Preto, SP Brazil. E-mail: cesar@pg.ffclrp.usp.br

³Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Avenida Bandeirantes, 3900, 14040-901, Ribeirão Preto, SP, Brazil; and National Institute of Science and Technology for Complex Systems, Avenida Bandeirantes, 3900, 14040-901 Ribeirão Preto, SP, Brazil. E-mail: asmartinez@usp.br

120 DETERMINISTIC TOURIST WALK

1 INTRODUCTION

Random walks over regular lattices and random media have been often studied and have wide range of applications [1, 2, 3]. Although not so thoroughly investigated, deterministic walks in regular [4, 5, 6] and disordered media [7] also present very interesting results. Here, we are interested in a partially self-avoiding deterministic walk algorithm, which we call the deterministic tourist walk (DTW) [8, 9].

A standard way to construct a disordered medium consists in randomly spreading N points (with coordinates uniformly distributed along the edges) on a d -dimensional hypercube. The determination of the distance and neighborhood statistics between any pair of points is known as the *random point problem* (RPP). One can consider these points as sites in a random landscape and a walker can move on them. Following the deterministic rule of, at each discrete time step, going to the nearest site not visited in the previous μ steps, a walker performs a partially self-avoiding walk, where self-avoidance is limited to the memory window $\tau = \mu - 1$. This quantity represents a characteristic time to the site to become attractive to the walker again (refractory time) and prohibits a trajectory from intersecting itself inside this memory window.

The tourist behavior depends strictly on the data set configuration. The tourist movements are entirely performed based on a neighborhood table. This table represents the *tourist graph*, i.e., nodes with $\mu - 1$ fixed directed and weighted outgoings each and with a variable number of incomings. Notice that the distances among the sites is simply a way to rank their neighborhood.

The paper is organized as follows. In Section 2, we present a study of the static characteristics of the underlying random medium on which the DTW is performed. Some geometrical properties are shown. In Section 3, the dynamics of the DTW is presented, showing its behavior when the memory μ and the dimension d are combined. Conclusions are presented in Section 4.

2 RANK NEIGHBORHOOD STATISTICS

The probability $P_{m,n}^{(d,N)}$ that an arbitrary point is the m th nearest neighbor of its own n th nearest neighbor in the RPP has been initially studied by Clark and Evans [10] and Clark [11] on some aspects of spatial pattern in biological populations. Figure 1 shows a geometrical representation for $d = 2$. They devised the term reflexive neighbors for the case $m = n$. Their work has been corrected by Dacey [12] ($m, n > 1$) in the context of geographical analysis and then generalized (for $m \neq n$) by Cox [13]. We call $P_{m,n}^{(d,N)}$ the *Cox probabilities*. We have calculated [14] these

probabilities using only Poisson distribution instead of the various distinct distributions used in the original paper [13]. Unlike Cox, we have written the resulting expression in terms of known functions (rather than in terms of an integral) and known distributions (multinomial, binomial and hypergeometric).

Figure 1 – Two-dimensional Poissonian process. There are i points in the intersection of the surfaces and in the I and J crescents there are $n - 1 - i$ and $m - 1 - i$ points, respectively.

In the following, we show the Cox probabilities for a finite number of dimensions. Then, we compute its high dimensional limit, that leads to the *random link model* (RLM). Also the *random map model* (RMM) is presented.

2.1 Cox probabilities in finite dimensionality

The original form of Cox probabilities is written as:

$$P_{m,n}^{(d)} = \sum_{i=0}^{\min(m-1, n-1)} \frac{(m+n-2-i)!}{i!(m-1-i)!(n-1-i)!} \times \frac{(1-I_d)^i I_d^{m+n-2-2i}}{(1+I_d)^{m+n-1-i}} \quad (1)$$

with $m = 1, 2, \dots, \infty$, $n = 1, 2, \dots, \infty$ and

$$I_d = I_{1/4} \left(\frac{1}{2}, \frac{d+1}{2} \right) \quad (2)$$

where

$$I_z(a, b) = \frac{\int_0^z dt t^{a-1} (1-t)^{b-1}}{B(a, b)}$$

with $\text{Re}(a) > 0$, $\text{Re}(b) > 0$ is the normalized incomplete beta function [15]. Geometrically, I_d represents the relative volume of the crescent compared to the hypersphere in a poissonian process, as shown in Figure 1 for $d = 2$ [14]. Notice that I_d depends exclusively on the dimensionality d of the RPP. Letting i vary from 1 to $\min(m, n)$ and rearranging the terms, one is able

to rewrite Eq. 1 as:

$$\frac{P_{m,n}^{(d)}}{P_{1,1}^{(d)}} = \sum_{i=1}^{\min(m,n)} \text{Mult} \left(i-1, m-i, n-i; \frac{1-I_d}{1+I_d}, \frac{I_d}{1+I_d}, \frac{I_d}{1+I_d} \right) \quad (3)$$

$$P_{1,1}^{(d)} = \frac{1}{1+I_d}, \quad (4)$$

where $P_{1,1}^{(d)}$ is the couple density (mutually nearest neighbors) and $\text{Mult}(n_a, n_b, n_c; \pi_a, \pi_b, \pi_c) = (n_a + n_b + n_c)! \pi_a^{n_a} \pi_b^{n_b} \pi_c^{n_c} / (n_a! n_b! n_c!)$ is the multinomial distribution.

2.2 High dimensionality probabilities and random link model

The distances between any pair of points are not all independent random variables, due to boundary effects and triangular restrictions. For fixed N in the RPP, as d increases, the boundary effects become more pronounced and the distances between pair of points become less correlated. Boundary effects can be minimized considering periodic boundary condition and, in the limit $d \rightarrow \infty$, all the two-point distances are independent and identically distributed (i.i.d.) random variables. This is the *random link model* (RLM) [16, 17], which is a mean field description of the RPP. We stress that in the RLM, there exist two Euclidean constraints: (i) the distance from a point to itself is always null ($D_{ii} = 0$, for all i) and (ii) the forward and backward distances are equal ($D_{ij} = D_{ji}$, for all i, j).

The high dimensionality limit for the Cox probabilities can be obtained directly from Eq. 3. In the thermodynamic limit ($N \gg 1$), the multinomial distribution becomes:

$$\frac{P_{m,n}^{(rI)}}{P_{1,1}^{(rI)}} = \text{Bin} \left(m-1, n-1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) \quad (5)$$

$$P_{1,1}^{(rI)} = \frac{1}{2}, \quad (6)$$

where $\text{Bin}(n_a, n_b; \pi_a, \pi_b) = (n_a + n_b)! \pi_a^{n_a} \pi_b^{n_b} / (n_a! n_b!)$ is the binomial distribution. Simple expressions can be obtained such as: $P_{1,n}^{(rI)} = 1/2^n$, $P_{2,n}^{(rI)} = n/2^{n+1}$.

Since here, Euclidean distances are only a means to obtain the ranking neighborhood probabilities, it is independent of particular choice for the distance probability distribution function (pdf) [18]. For simplicity, we will consider uniform deviates in the interval $[0, 1]$ for the distances among the N points. In the

random link case, one is able to obtain the Cox probability for a finite system. To take into account finite size effects, just replace the binomial distribution of Eq. 5 by:

$$\frac{P_{m,n}^{(rI,N)}}{P_{1,1}^{(rI,N)}} = \text{Hypg}(N-2, N-2; m-1, n-1) \quad (7)$$

$$P_{1,1}^{(rI,N)} = \frac{N-1}{2N-3}, \quad (8)$$

with $m = 1, 2, 3, \dots, N-1$ and $n = 1, 2, 3, \dots, N-1$, where

$$\text{Hypg}(N_a, N_b; n_a, n_b) = \frac{\binom{N_a}{n_a} \binom{N_b}{n_b}}{\binom{N_a + N_b}{n_a + n_b}}$$

is the hypergeometric distribution. Obviously, these equations (Eqs. 7 and 8) reduce to Eqs. 5 and 6 as $N \gg 1$.

We observe that one can use the determinism of the algorithm of pseudo random number generator to obtain very large random link model data sets [19]. Up to date, we have not being able to consider finite size effects for Eq. 3 and 4. One must generalize the hypergeometrical distribution so that for $N \gg 1$ one obtains the multinomial one.

2.3 Random map model

Breaking the distance symmetry constraint in the RLM the *random map model* (RMM) [20] is obtained. The RMM is the mean field approximation to the Kauffman's model [21] and analytical results may be obtained. Also, Cox probabilities can be obtained for the RMM.

In the case in which the constraint $D_{ii} = 0, \forall i$ is preserved, if an arbitrary point I is chosen, its m th neighbor J is automatically set, but the n th neighbor of J is equally probable to be anyone of the other $N-1$ points, since the distances are totally independent. Thus, the probability $P_{m,n}^{(rm)}$ that the point I is the n th neighbor of its m th neighbor is simply:

$$P_{m,n}^{(rm)} = \frac{1}{N-1}, \quad (9)$$

where $m = 1, 2, \dots, N-1$ and $n = 1, 2, \dots, N-1$.

On the other hand, in the case which $D_{ii} \neq 0$ is allowed, the probability $P_{m,n}^{(rm)}$ is twice as large for reflexive neighbors than for non-reflexive ones, because now one must consider that every point is always its own m th nearest neighbor, for some m . Therefore:

$$P_{m,n}^{(rm)} = \frac{1 + \delta_{m,n}}{N+1}, \quad (10)$$

122 DETERMINISTIC TOURIST WALK

where $\delta_{m,n}$ is the Kronecker's delta, $m = 1, 2, \dots, N$ and $n = 1, 2, \dots, N$. Notice that in the thermodynamic limit $N \gg 1$, these cases are still distinguishable due to the presence of the factor 2 for the reflexive neighbors.

3 SOME RESULTS ON THE DETERMINISTIC TOURIST WALK

All DTW have an initial transient part of length t and end in cycles. Each cycle has a period p . Both transient time and cycle period can be combined in the joint distribution $S_{\mu,d}^{(N)}(t, p)$. In the following we consider some special cases obtained combining μ and d .

3.1 Lazy tourist

The simplest case to deal with the DTW is to consider $\mu = 0$. In the following we present the result for an arbitrary dimensionality and for the random map model.

3.1.1 Arbitrary dimensionality Euclidean space

This case is trivial, since the walker has a null-size memory. The walker remains at the same site and the trajectory has a zero-length transient and a cycle of period $p = 1$. The transient and period joint distribution is simply given by:

$$S_{0,d}^{(N)}(t, p) = \delta_{t,0} \delta_{p,1}, \quad (11)$$

where $\delta_{i,j}$ is the Kronecker's delta.

Despite its triviality, this becomes interesting because it is the simplest situation of the stochastic tourist walk [22]. Also, in the deterministic situation, the $\mu = 0$ case can be analytically solved and presents non-trivial solutions for the RMM, as we see below.

3.1.2 Random map

In this model, the lazy tourist may not exist, since the distance, which may be interpreted as the cost, can be greater to remain in a site than going away, in this case the walker may not stay at the same site. Thus, even for $\mu = 0$, non-trivial transient time and cycles distributions may exist. Indeed, the transient time and period cycles joint distribution for a random map with N points is [18]:

$$S_{0,rm}^{(N)}(t, p) = \frac{\Gamma[N]}{\Gamma[N+1-(t+p)]N^{t+p}}. \quad (12)$$

We call attention to the fact that the relevant variable is $n_e = t + p$, which is the number of explored sites along the

trajectories. The period distribution is simply:

$$S_{0,rm}^{(N)}(p) = \sum_t S_{0,rm}^{(N)}(t, p),$$

and for $N \gg 1$, it can be approximated by:

$$S_{0,rm}^{(N)}(p) = \sqrt{\frac{\pi}{2N}} \operatorname{erfc}\left(\frac{p}{\sqrt{2N}}\right) \approx \frac{e^{-p^2/(2N)}}{p}, \quad (13)$$

where it is interesting to point out that for $p \ll \sqrt{2N}$ the period distribution decays as a power law: $S_{0,rm}^{(N)}(p) \approx p^{-1}$, independently of the size N of the system.

3.2 Memoryless tourist

For $\mu = 1$, the walker knows only the nearest neighbor of the current site. Thus, at each time step, he must leave the current site and go to the nearest one. The name "memoryless tourist" is devised because the walker knows the site he is, but does not remember any of the previously visited ones. This rule does not lead to exploration of the random medium, since after a very short transient time the walker gets trapped by a couple of mutually nearest neighbors. These couples are the attractors of the system, and the period distribution is simply

$$S_{1,d}^{(N)}(p) = \sum_t S_{1,d}^{(N)}(t, p) = \delta_{p,2}.$$

The transient time and period joint distribution has been analytically obtained for $N \gg 1$ [18]:

$$S_{1,d}^{(\infty)}(t, p) = \frac{\Gamma(1 + I_d^{-1})(t + I_d^{-1})}{\Gamma(t + p + I_d^{-1})} \delta_{p,2}, \quad (14)$$

where $\Gamma(z)$ is the gamma function and I_d is given by Eq. 2.

3.3 Tourist with memory

Interesting phenomena occur when greater values of μ are considered. In this case, the cycle distribution is no longer peaked at $p_{\min} = \mu + 1$, but presents a whole spectrum of cycles with period $p \geq p_{\min}$, with possible power-law decay [8, 9, 23].

3.4 One-dimensional systems

It is interesting to point out that, for 1D systems, determinism imposes serious restrictions, as we discuss below.

3.4.1 Very short memory

For $\mu \ll N$, cycles of period $p \in [2\mu + 1, 2\mu + 3]$ are forbidden. Additionally, for $\mu = 2$ all odd periods but $p_{\min} = 3$

are forbidden. The number of site per attractor is [8]:

$$n(p) = \frac{p}{2} + \tau + 1. \quad (15)$$

3.4.2 Crossover between localized and extended regimes

As one can see in Figure 3, the heavy tail of the period marginal distribution $S_{\mu,d}^{(N)}(p)$ allows the walker to explore the whole system even for small memory values ($\mu \ll N$). If a walker starts to walk in one extremity of a 1D map, he can reach the other extremity (using open boundary conditions) if he takes N steps without changing its walking direction. So, he needs a memory μ large enough to avoid being trapped in cycles. For a given memory μ , this occurs with probability [24, 25]:

$$P(N|\mu) = (1 - 2^{-\mu})^{N-\mu-1}. \quad (16)$$

Figure 2 shows the graphics of Eq. 16 for three values of N . One can easily see the existence of an abrupt change in the walker's exploratory behavior in 1D at a narrow memory range. Considering $N \gg \mu + 1$ and computing the inflection point of Eq. 16, one can determine the value of memory at which the transition takes place:

$$\mu_1 = \log_2 N. \quad (17)$$

The width of the transition range is independent of N : $\varepsilon = e/\ln 2$.

Figure 2 – Graphics of Eq. 16 for $N = 10, 100$ and 1000 . It is possible to see the existence of an abrupt transition in the value of $P(N|\mu)$ at $\mu_1 = \log_2 N$ in a narrow memory range $\varepsilon = e/\ln 2$.

On one hand, for $\mu < \mu_1$, the walker is trapped in cycles inside the system. The walker cannot reach the other extremity and the exploration remains local. On the other hand, if $\mu > \mu_1$, the number of visited points increases, allowing the walker to reach the other extremity and the exploration becomes global.

3.5 Higher dimensionalities

Figure 3 shows the t and p joint distribution histograms for $\mu = 9$ and $\mu = 25$ with $N = 1000$ and $d = 2$. As application of these deterministic walks, the cycles have been used as a thesaurus characterization [23], a clusterization method [26] and in texture analysis in images [27, 28].

3.6 Mean field approximation

The mean field approximation consists on making each point to interact with the same intensity with all the others in the system. In the following, we analyze two systems which have this feature: the *random link* and the *random map* models. The first is the natural high dimensional limit for the tourist walk problem. The second is the only analytically solved case that has a non-trivial distribution of cycles even for the lazy and memoryless tourist cases. Both models have been studied for the tourist walk in Ref. [18].

3.6.1 Random link

As the number of dimensions of the euclidean space increases, the correlations between distances weaken down. When $d \rightarrow \infty$, these correlations can be neglected and the distances between points considered as independent random variables. In this model, the transient time distribution, in the thermodynamical limit, to the memoryless tourist walk can be obtained taking the limit of $d \rightarrow \infty$ in Eq. 14:

$$S_{1,rl}^{(\infty)}(t) = \frac{t+1}{(t+2)!}. \quad (18)$$

For $\mu = 2$, the transient time and period cycle joint distribution is [29]:

$$S_{2,rl}^{(N)}(t, p) = \frac{e^{-\frac{(t+p-2)(t+p-3)/2}{3N}}}{(3 - \delta_{t,0})N}. \quad (19)$$

The marginal distributions of transient time and period are, respectively:

$$S_{2,rl}^{(N)}(t) = \left(1 + \frac{\delta_{t,0}}{2}\right) \sqrt{\frac{\pi}{6N}} \operatorname{erfc}\left(\frac{t}{\sqrt{6N}}\right), \quad (20)$$

$$S_{2,rl}^{(N)}(p) = \sqrt{\frac{\pi}{6N}} \operatorname{erfc}\left(\frac{p-7/2}{\sqrt{6N}}\right) \approx \frac{e^{-p/(6N)}}{p}. \quad (21)$$

We call attention to the fact that the decay of the transient time distribution for $\mu = 1$ is much faster than for $\mu \geq 2$. This is due to the main mechanism, which is driven by extreme value statistics in the $\mu = 1$ case and by combinatorial statistics for

124 DETERMINISTIC TOURIST WALK

Figure 3 – Joint distribution of transient time (t) and period (p) with $N = 1000$ and $d = 2$ for two values of μ . One observes that the general aspects of both histograms are similar.

$\mu = 2$. This change, from extreme value statistics to combinatorial one, converts the $\delta_{p,2}$ distribution for $\mu = 1$ to a wide period distribution power-law decay for $\mu \geq 2$ (Eq. 21). From these considerations, one concludes that even a memory window of a single step drastically favors the walker to explore the random medium.

3.6.2 Random map

In this model, all symmetry restrictions are relaxed, and the distance from one point to itself is not necessarily null. So, for a N -point map, there are N^2 independent random distances. The transient time and period joint distribution and the period marginal distribution for this case, with $\mu = 0$, are respectively given by Eq. 12 and Eq. 13. For the quantity $n_e = t + p$, Eq. 12 becomes:

$$S_{0,rm}^{(N)}(n_e) = \frac{n_e \Gamma[N]}{\Gamma[N - n_e - 1] N^{n_e}}. \quad (22)$$

One can observe that this distribution diverges at the thermodynamical limit.

3.6.3 Equivalence between the random link and random map models

The random link and random map models are the mean field approximations of the random point problem and Kaufmann's model, respectively. These models are very different in essence, nevertheless their mean field approximations are similar. If one

compares Eq. 21 to Eq. 13, one sees a non-trivial equivalence between RMM with $3N$ points and $\mu = 0$ and RLM with N points and $\mu = 2$ [29].

4 CONCLUSION

Although less investigated than random walks, deterministic walks also present very interesting results. In this paper we revised the random point problems and the deterministic tourist walks. For the random point problem, we have shown some geometrical characteristics and the static properties of the medium in which the DTW takes place. We have presented the behavior of the DTW depending on the system dimensionality d and the walker's memory μ , pointing out the transient time and period joint distributions and the existence of a crossover transition in 1D systems.

ACKNOWLEDGMENTS

R.S. González (140420/2007-0), J.M. Berbert (134461/2007-0) and A.S. Martínez (303990/2007-4 and 476862/2007-8) acknowledges the Brazilian agency CNPq for support. W.T.R. Oliveira acknowledges the Brazilian agency FAPEMAT for support.

REFERENCES

- [1] FISHER D.S. 1984. Phys. Rev. A, 30: 960.
- [2] METZLER R & KLAFTER J. 2000. Phys. Rep., 339: 1.
- [3] DERRIDA B. 1997. Physica D 107: 186.
- [4] FREUND H & GRASSBERGER P. 1992. Physica A, 190: 218.

- [5] BUNIMOVICH LA & TROUBETZKOY SE. 1992. J. Stat. Phys., 67: 289.
- [6] GALE D, PROPP J, SUTHERLAND S & TROUBETZKOY S. 1995. Math. Intelligencer, 17: 48.
- [7] BUNIMOVICH LA. 2004. Physica D, 187: 20.
- [8] LIMA GF, MARTINEZ AS & KINOUCI O. 2001. Phys. Rev. Lett., 87: 010603.
- [9] STANLEY HE & BULDYREV SV. 2001. Nature (London), 413: 373.
- [10] CLARK PJ & EVANS FC. 1955. Science, 121: 397.
- [11] CLARK PJ. 1956. Science, 123: 373.
- [12] DACEY MF. 1969. Geographical Analysis, 1: 385.
- [13] COX TF. 1981. Biometrics, 37: 367.
- [14] TERÇARIOL CAS, MOURA KIIPPER F & MARTINEZ AS. 2007. J. Phys. A, 40: 1981.
- [15] ABRAMOWITZ M & STEGUN IA. (eds.) 1972. Handbook of Mathematical Functions (Dover Publications, New York).
- [16] MÉZARD M & PARISI G. 1986. Europhys. Lett., 2: 913.
- [17] PERCUS AG & MARTIN OC. 1996. Phys. Rev. Lett., 76: 1188.
- [18] TERÇARIOL CAS & MARTINEZ AS. 2005. Phys. Rev. E, 72: 021103.
- [19] TERÇARIOL CAS & MARTINEZ AS. 2006. Braz. J. Phys., 36: 232.
- [20] DERRIDA B & FLYVBJERG H. 1987. J. Phys. (Paris), 48: 971.
- [21] KAUFFMAN SA. 1969. J. Theor. Biol., 22: 437.
- [22] RISAU-GUSMAN S, MARTINEZ AS & KINOUCI O. 2003. Phys. Rev. E, 68: 016104.
- [23] KINOUCI O, MARTINEZ AS, LIMA GF, LOURENO GM & RISAU-GUSMAN S. 2002. Physica A, 315: 665.
- [24] TERÇARIOL CAS, GONZALEZ RS & MARTINEZ AS. 2007. Phys. Rev. E, 75: 061117.
- [25] TERÇARIOL CAS, GONZALEZ RS, OLIVEIRA WTR & MARTINEZ AS. 2007. Physica A.
- [26] CAMPITELI MG, KINOUCI PDO & MARTINEZ AS. 2006. Phys. Rev. E, 74: 026703.
- [27] BACKES AR, BRUNO OM, CAMPITELI MG & MARTINEZ AS. 2006. Lect. Note Comput. Sci., 4225: 784.
- [28] CAMPITELI MG, MARTINEZ AS & BRUNO OM. 2006. Lect. Note Comput. Sci., 4140: 159.
- [29] TERÇARIOL CAS & MARTINEZ AS. 2008. Physical Review E, 78: 070603.