# Notas sobre o passeio aleatório

J. Viana Lopes

13 de Novembro de 2008

## Conteúdo



## 1 O passeio aleatório simples

Consideremos um caminhante que pode tomas posições discretas $X(t)$ numa recta ($X(t) \in Z$). Assumindo que para $X(0) = 0$ e que em cada incremento de tempo $\Delta t = 1$ o caminhante pode movimentar-se ou para a esquerda ou para a direita respectivamente com probabilidades $p_L$ e $p_R$ ($p_R + p_L = 1$). Como podemos descrever a posição do caminhante para um tempo $t = T$? Naturalmente a evolução temporal da posição da caminhante não é bem determinada uma vez que a dinâmica é intrinsecamente estocástica. A melhor forma de descrevermos a posição da caminhante no instante $T$ é através de uma distribuição de probabilidade que naturalmente descreve a frequência com o caminhante chega a uma posição $X$ ao final de $T$ passos de tempo dado que iniciou o seu passeio no instante inicial na posição $X = 0$.

Em cada incremento de tempo apenas existem duas possibilidades de evolução: o caminhante desloca-se para a esquerda ou para a direita. Deste modo uma trajectória do caminhante pode ser descrita pela sequência de movimentos

$$\underbrace{RLRRL \cdots LLLLRRRRR}_{T \text{ elementos}}.$$

Repare-se que a posição final não depende da sequência concreta de movimentos mas apenas do número de movimentos de cada tipo que foram realizados. Deste modo

$$X = N_R - N_L = 2N_R - T$$

onde $N_R$ é o número de movimentos para a direita e $N_L$ o número de movimentos para a esquerda ($N_R + N_L = T$).

A probabilidade com que um determinado trajecto é efectuado é dada por

$$\text{probabilidade de um determinado trajecto} = p_R^{N_R} p_L^{N_L}.$$

Qualquer permutação da sequência de $T$ passos atrás apresentada (trocas de $L$ com $R$) leva o caminhante ao final de $T$ passos à mesma posição $X$. A probabilidade com que o caminhante, está numa determinada posição $X$ está directamente relacionada com a probabilidade com que são dados $N_R$ passos. Esta probabilidade é obtida multiplicando a probabilidade de uma trajectória pelo número de trajectórias diferentes com $N_R$ fixo,

$$P(N_R) = \frac{T!}{(T - N_R)! N_R!} p_R^{N_R} (1 - p_R)^{T - N_R}$$

uma vez que $T!/(N_R!(T - N_R)!)$ é o número de permutações diferentes que podemos efectuar na sequência.

Usando o binómio de Newton podemos verificar que a probabilidade é normalizada,

$$\sum_{N_R=0}^{T} \frac{T!}{(T - N_R)! N_R!} p_R^{N_R} (1 - p_R)^{T - N_R} = (p_R + 1 - p_R)^T = 1.$$

Com este resultado podemos com facilidade calcular:

- O número médio de passos dados para a direita ao final do tempo $T$ é dado por

$$\langle N_R \rangle = \sum_{n=0}^{T} \frac{T!}{(T - n)! n!} p_R^n p_L^{T-n} n = p_R \frac{d(p_R + p_L)^T}{dp_R} = p_R T.$$

- A variância do número de passos para a direita $\sigma^2(N_R) = \langle N_R^2 \rangle - \langle N_R \rangle^2$.

Calculando,

$$\langle N_R^2 \rangle = p_R \frac{d}{dp_R} p_R \frac{d}{dp_R} (p_R + p_L)^T = RT(1 + R(T-1)),$$

obtemos $\sigma^2(N_R) = 4p_R p_L$.

A distribuição de probabilidades da posição é dada por

$$P(X,T) = \frac{T!}{\left(\frac{X+T}{2}\right)!\left(\frac{T-X}{2}\right)!} p_R^{(T+X)/2} p_L^{(T-X)/2}$$

e os momentos naturalmente são

$$\begin{aligned}\langle X \rangle &= (p_R - p_L)T \\ \sigma^2(X) &= 4p_R p_L T\end{aligned}$$

Ou seja o valor médio desloca-se para $p_R \neq p_L$ proporcionalmente ao tempo (deslocamento da probabilidade) enquanto que a largura da distribuição aumenta com $\sqrt{T}$ (difusão). Esta descrição permite identificar dois tipos de regimes com os quais a distribuição de probabilidades se altera no tempo.

Para tempos longos a distribuição de probabilidades está contida entre $-T$ e $T$ mas apenas tem valores significativamente diferentes de zero numa região proporcional a $\Delta X$ em torno do valor médio. Neste regime é apropriado fazer uma descrição no contínuo, consideremos a variável $x = X/T$, utilizando a fórmula de Stirling,

$$\ln N! = N \ln N - N + \frac{1}{2}\ln(2\pi N)$$

podemos calcular

$$\begin{aligned}\ln P(X,T) = \ln P(xT,T) &= \ln\left(\frac{T!}{\left(\frac{T+xT}{2}\right)!\left(\frac{T-xT}{2}\right)!} p_R^{(T+xT)/2}(1-p_R)^{(T-xT)/2}\right) \\ &= -\frac{1}{2}\ln\left(2\pi T\frac{1-x^2}{4}\right) + Tf(x)\end{aligned}$$

onde

$$f(x) = \frac{1+x}{2}\ln\left(\frac{2p_R}{1+x}\right) + \frac{1-x}{2}\ln\left(\frac{2p_L}{1-x}\right).$$

No limite de $T$ grande o máximo da distribuição de probabilidade coincide com o máximo de $f(x)$,

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x_m} = 0 \Rightarrow x_m = p_R - p_L$$

que como era de esperar corresponde ao valor médio $\langle x\rangle$. Expandindo $f(x)$ em torno do valor máximo optemos

$$f(\langle x\rangle + \delta) = -\frac{1}{2}\frac{\delta^2}{1-(p_R-p_L)^2} = -\frac{\delta^2}{8p_Rp_L}$$

deste modo

$$P(X,T) = \frac{\exp\left(-\frac{(X-T(p_R-p_L))^2}{8p_Rp_LT}\right)}{\sqrt{2\pi Tp_Rp_L}}.$$

é comum descrever o comportamento desta distribuição como a coexistência de dois regimes:

- O deslocamento do máximo caracterizado por uma velocidade constante v $= p_R - p_L$.
- A difusão da probabilidade que descreve o modo como a distribuição alarga com $\sqrt{T}$ à qual associamos a difusividade $D = 2p_Rp_L$.

Passando ao contínuo (é necessário multiplicar por $T/2$, reparem que no discreto $X$apenas toma valores de dois em dois...)

$$P(x) = \frac{\exp\left(-\frac{(x-\langle x\rangle)^2}{2\sigma^2}\right)}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}$$

onde $\langle x\rangle = p_R - p_L$ e $\sigma^2 = 4p_Rp_L/T$. Nas unidades intensivas a função de distribuição fica centrada na mesma posição mas estreita com a evolução temporal.

## 2 Equação mestra

Até agora estudamos o problema do passeio aleatório utilizando informalmente alguns conceitos probabilísticos. O problema anterior pode pode ser entendido como o estudo da evolução temporal de uma distribuição de probabilidade inicial $P(X,0) = \delta_{X,0}$. A evolução temporal é definida pelas probabilidades condicionadas $p_R$ e $p_L$. Nesta secção interessa formalizar um pouco mais estes conceitos.

Consideremos a probabilidade conjunta de a nossa variável ter um determinado valor $X_1$ em $t_1$ e o valor $X_2$ em $t_2$

$$P(X_1,t_1;X_2,t_2)$$

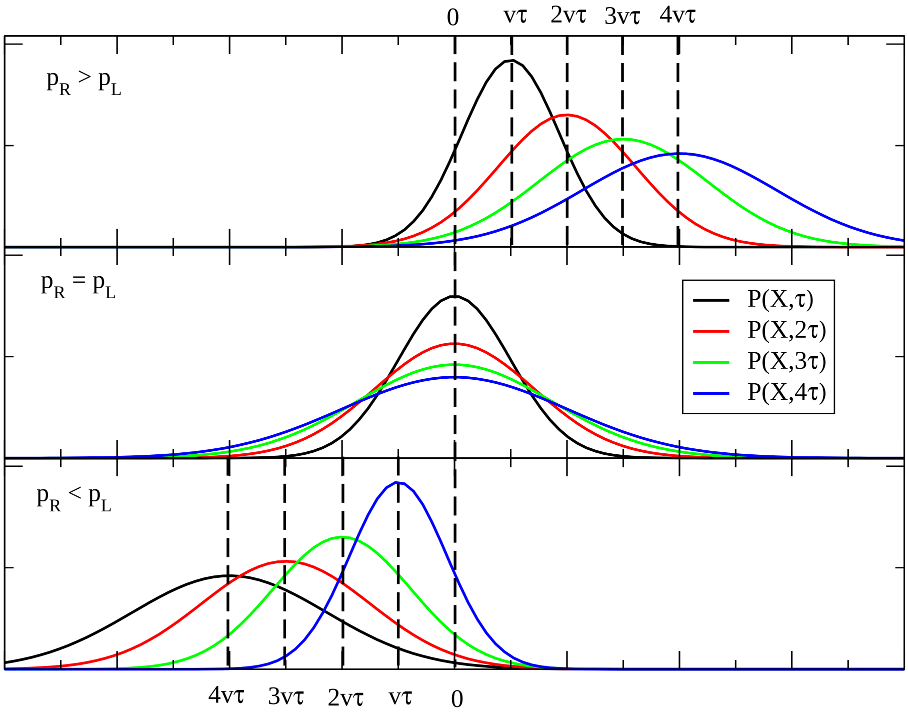


Figura 1: Na figura está representada a evolução temporal da distribuição de probabilidade da posição partindo em $T = 0$ de $X = 0$. Estão representadas evoluções com velocidade positiva e negativa assim como uma evolução eminentemente difusiva.

naturalmente, podemos a partir da desta definição obter,

$$\begin{aligned}
\sum_{X_1} P(X_1, t_1; X_2, t_2) &= P(X_2, t_2) \\
\sum_{X_2} P(X_1, t_1; X_2, t_2) &= P(X_1, t_1) \\
\sum_{X_2 X_1} P(X_1, t_1; X_2, t_2) &= 1
\end{aligned}$$

Podemos definir a probabilidade condicionada de dado no instante $t_1$ estarmos em $X_1$ passarmos em $t_2$ para $X_2$,

$$P(X_2, t_2 | X_1, t_1) = \frac{P(X_1, t_1; X_2, t_2)}{P(X_1, t_1)}$$

naturalmente,

$$\begin{aligned}
\sum_{X_2} P(X_2, t_2 ! X_1, t_1) &= 1 \\
\sum_{X_1} P(X_2, t_2 ! X_1, t_1) P(X_1, t_1) &= P(X_2, t_2)
\end{aligned}$$

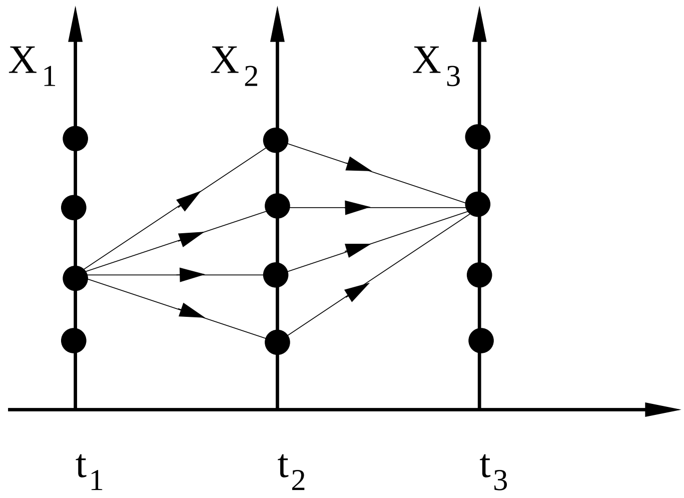


Figura 2: A probabilidade do caminhante chegar a um determinado valor de $X_3$ em $t_3$ dado que em $t_1$ teve um valor de $X_1$ é obtida somando sobre todos os valores possíveis de $X_2$, ou seja, somando sobre todas as trajectórias possíveis.

Se a probabilidade condicionada apenas depender da diferença de tempos e não do tempo inicial, dizemos que o processo estocástico é um processo de Markov e a matriz de probabilidade condicionada é chamada a matriz de Markov. Se tivermos um processo de Markov, podemos escrever,

$$P(X_3, t_3; X_2, t_2; X_1, t_1) = P(X_3, t_3 - t_1 | X_2) P(X_2, t_2 - t_1 | X_1) P(X_1, t_1).$$

A probabilidade de estar em $X_3$ em $t_3$ e em $X_1$ em $t_1$, é obtida somando sobre todos os valores $X_2$ possíveis em $t_2$,

$$P(X_3, t_3; X_1, t_1) = \sum_{X_2} P(X_3, t_3 - t_1 | X_2) P(X_2, t_2 - t_1 | X_1) P(X_1, t_1),$$

ou seja, somamos sobre todos os caminhos possíveis que levam de $X_1$ até $X_3$. Se os intervalos de tempo forem iguais, podemos abreviar,

$$\Omega_{i,j} = P(X = i, \Delta t | j)$$

e a evolução da probabilidade é dada por

$$P_i(t + \Delta t) = \Omega_{ij} P_j(t)$$

e naturalmente

$$P_i(t) = \sum_j \left[\Omega^{t/\Delta t}\right]_{ij} P_j(0)$$

onde $\Omega^m$ representa a matriz de Markov levantada à potência $m$. A matriz de Markov descreve completamente a dinâmica do processo estocástico assim como as suas características assimptóticas. As matrizes de Markov normalmente não são matrizes simétricas e os elementos são sempre reais não nulos inferiores a 1. Das propriedades das probabilidades condicionadas podemos concluir que

$$\sum_j \Omega_{ji} = 1.$$

Estas matrizes admitem sempre um estado estacionário, ou seja,

$$P_j^{eq} = \sum_i \Omega_{ji} P_i^{eq},$$

a aplicação da matriz de evolução, mantém o estado estacionário inalterado. Desta expressão, concluímos que a/as distribuições assimptóticas, são vectores próprios com valor próprio $\lambda = 1$. As matrizes de Markov admitem um conjunto de valores próprios e vectores próprios. Seja um vector próprio $P$,

$$\lambda P_j = \sum_i \Omega_{ji} P_i$$

somando sobre $j$ concluímos que

$$(\lambda - 1) \sum_i P_i = 0.$$

Ou seja, para $\lambda \neq 1$ o somatório da probabilidade de todos os estados deverá ser nula. Para $\lambda = 1$, este somatório pode ser diferente de zero, e na realidade é 1 uma vez que estes vectores próprios representam a distribuição assimptótica. Também deste resultado concluímos que é impossível preparar um sistema com uma probabilidade inicial que seja proporcional a qualquer um dos vectores próprios com $\lambda \neq 1$. Qualquer valor próprio respeita a condição $|\lambda| \leq 1$.

Como em geral esta matriz não é simétrica, admite vectores próprios à esquerda e à direita (diferentes!), deste modo

$$\begin{aligned}
\lambda_\alpha r_i^\alpha &= \sum_j \Omega_{ij} r_j^\alpha \\
\lambda_\alpha l_i^\alpha &= \sum_j l_j^\alpha \Omega_{ji}.
\end{aligned}$$

Os vectores à esquerda e à direita podem ser ortogonais,

$$(\lambda_\alpha - \lambda_\beta) \sum_i l_i^\alpha r_i^\beta = 0,$$

caso estejam associados a valores próprios diferentes.

Supondo que o espectro de valores próprios não é degenerado, podemos construir uma base ortogonal, e escrever a distribuição de probabilidade inicial como uma combinação dos vectores próprios à direita,

$$P_i(0) = \sum_\alpha a_\alpha r_i^\alpha,$$

se multiplicarmos ambos os membros por $l_i^\beta$ e somarmos sobre $i$,

$$\sum_i P_i(0) l_i^\beta = \sum_{\alpha,i} a_\alpha r_i^\alpha l_i^\beta = \sum_\alpha a_\alpha \delta_{\alpha\beta} \sum_i r_i^\beta l_i^\beta = a_\beta \sum_i r_i^\beta l_i^\beta.$$

Deste modo

$$\begin{aligned} P_j(0) &= \sum_\alpha a_\alpha r_j^\alpha \\ a_\alpha &= \frac{\sum_i P_i(0) l_i^\alpha}{\sum_i r_i^\alpha l_i^\alpha} \end{aligned}$$

Como a probabilidade no tempo $t$ é obtida por aplicação da matriz Markov $t/\Delta t$ vezes à distribuição inicial, concluímos que

$$P_j(t) = \sum_\alpha a_\alpha r_j^\alpha \lambda_\alpha^{t/\Delta t}.$$

Esta expressão é particularmente reveladora pois diz-nos que no limite assimptótico no tempo apenas sobrevivem os termos com $|\lambda_\alpha| = 1$. Todas as restantes parcelas decaem para zero exponencialmente. O maior valor próprio com módulo inferior a 1 fornece o tempo de relaxação mais lento da matriz de Markov, $\tau = -1/\ln(\lambda)$, caso os coeficientes $a_\alpha$ não percorram ordens de grandeza.

# 3 Descrição através da equação mestra

Consideremos o passeio aleatório com um probabilidade de permanência na mesma posição. A equação mestra que governa a evolução temporal da probabilidade de presença na posição $k$ é dada por

$$P_k(t+1) = p_L P_{k+1}(t) + p_R P_{k-1}(t) + (1 - p_R - p_L) P_k(t),$$

uma vez que todas probabilidades de transição entre estados que distem mais do que uma unidade de espaço são nulas.

## 3.1 Dependência temporal dos momentos

A evolução do valor médio da posição no tempo é obtida a partir de

$$\sum_k k P_k(t+1) \equiv \langle X \rangle (t+1) = \langle X \rangle (t) + p_R - p_L$$

e a evolução da variância, por,

$$\sigma^2(t+1) \equiv \langle X^2 \rangle (t+1) - \langle X \rangle^2 (t+1) = \sigma^2(t) + p_R + p_L - (p_R - p_L)^2.$$

Considerando, a condição inicial $P_k(0) = \delta_{k,0}$, obtemos

$$\begin{aligned} \langle X \rangle (t) &= t(p_R - p_L) \\ \sigma^2(t) &= t\left(p_R + p_L - (p_R - p_L)^2\right). \end{aligned} \tag{1}$$

Note-se que ambas as expressões reduzem-se às atrás deduzidas para o caso anteriormente estudado se impusermos que $p_R + p_L = 1$. Apesar de termos incluído a possibilidade de permanência na mesma posição em cada incremento de tempo, as propriedades gerais não são alteradas:

- O valor médio desloca-se proporcionalmente ao tempo (deslocamento da probabilidade, *drift*).

- A largura para $p_R p_L \neq 0$ cresce proporcionalmente a $\sqrt{t}$ (difusão da probabilidade).

## 3.2 Descrição no contínuo

Existem muitos exemplos de processos estocásticos descritos eminentemente em tempo contínuo. Nesta situação em vez de falarmos em probabilidades de transição os processos são discutidos em termos de taxas de transição por unidade de tempo, $\omega$ . Se discretizarmos o tempo em pequenas unidades $\delta t$,

$$\begin{aligned} p_R &= \omega_R \delta t \\ p_L &= \omega_L \delta t \end{aligned}$$

podemos escrever a equação mestra

$$P_k(t+\delta t) = \omega_R \delta t P_{k-1}(t) + \omega_L \delta t P_{k+1}(t) + (1 - \delta t(\omega_R + \omega_L))P_k(t)$$

o que no limite em que $\delta t \to 0$,

$$\frac{\partial P_k}{\partial t} = \omega_R \left(P_{k-1} - P_k\right) + \omega_L \left(P_{k+1} - P_k\right).$$

Na situação em que a largura da distribuição é superior à unidade e a distribuição de probabilidade é razoavelmente contínua podemos passar para o contínuo de posições. Consideremos que o caminhante ocupa posições separadas por uma largura $\delta x$ e deste modo passamos de $P_k$ para $P(x)$

$$\begin{aligned} P_{k-1} - P_k \equiv P(x - \delta x) - P(x) &\sim -\frac{dP}{dx}\delta x + \frac{1}{2}\frac{d^2 P}{dx^2}\delta x^2 + O(\delta x^3) \\ P_{k+1} - P_k \equiv P(x + \delta x) - P(x) &\sim \frac{dP}{dx}\delta x + \frac{1}{2}\frac{d^2 P}{dx^2}\delta x^2 + O(\delta x^3) \end{aligned}$$

e a equação mestra transforma-se numa equação de conservação da probabilidade

$$\frac{dP}{dt} = -\frac{dj}{dx}$$

onde$j$ é a corrente de probabilidade que atravessa a posição $x$. A corrente de probabilidade é dada por

$$j = \mathrm{v}P(x) - D\frac{dP}{dx}$$

onde naturalmente $\mathrm{v} = (\omega_R - \omega_L)\delta x$ e $D = (\omega_R + \omega_L)\delta x^2/2$.

## 3.3 Resolução da equação de conservação

### Existindo apenas deslocamento

Se o termo dominante for o termo de deslocamento a equação reduz-se a

$$\frac{dP}{dt} = -\mathrm{v}\frac{dP}{dx}$$

cuja solução é

$$P(x,t) = P(x - \mathrm{v}t, 0)$$

ou seja a distribuição de probabilidade não se deforma e apenas se desloca com velocidade constante.

**Existindo apenas difusão**

Neste caso a equação transforma-se numa equação de difusão

$$\frac{dP}{dt} = D\frac{d^2P}{dx^2}$$

A solução neste caso é um caso particular da próxima e por isso iremos apresentar a solução mais geral.

**Solução com difusão e deslocamento**

Seja a transformada de Fourier da distribuição de probabilidade

$$\Phi(k,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dx P(x,t)\exp(-ikx)$$

efectuando a transformada de Fourier aos dois membros da equação de conservação obtemos

$$\frac{d\Phi(k,t)}{dt} = -(ik\mathrm{v} + k^2D)\Phi(k,t)$$

que naturalmente implica

$$\Phi(k,t) = \phi(k,0)\exp\left(-(i\mathrm{v}k + Dk^2)t\right)$$

considerando a distribuição inicial uma gaussiana centrada em $x = 0$ e com largura $\sigma_0$, obtemos

$$\Phi(k,0) = \frac{\exp\left(-k^2\sigma^2/2\right)}{\sqrt{2\pi}}.$$

Calculando a transformada de Fourier inversa, obtemos,

$$P(x,t) = \frac{\exp\left(-\frac{(x-\mathrm{V}t)^2}{2(\sigma_0^2+2Dt)}\right)}{\sqrt{2\pi(\sigma_0^2 + 2Dt)}}.$$

O evolução da distribuição de probabilidades mantém todas as características que já foram enunciadas até agora. Contudo o coeficiente de difusão apresenta uma pequena diferença, no caso discreto era $D = 2p_Rp_L$ enquanto que no contínuo é

$D = (\omega_R + \omega_L)\delta x^2/2$. Se substituirmos na equação 1 as probabilidades de transição pelo produto das taxas com a unidade de tempo,

$$D = \frac{(\omega_R + \omega_L)\delta t}{2} - \frac{((\omega_R + \omega_L)\delta t)^2}{2}$$

verificamos que no limite $\delta t \to 0$ apenas faz sentido manter o termo linear e não é possível manter a restrição $p_R + p_L = 1$.

# 4 Resolução da equação mestra numa caixa

Os argumentos apresentados permitem responder a algumas questões de ordens de grandeza e escalas. Até agora nunca consideramos fronteiras no nosso passeio aleatório, mas imaginemos, eu existe uma caixa,

- Se o processo for difusivo (v = 0), estado assimptótico deverá ser uniforme. Partindo de qualquer estado inicial, a difusão espalha a probabilidade por todas as posições. Uma vez que o número de posições limitado, este processo deverá convergir para a distribuição uniforme.

- A escala de tempo que um processo difusivo necessita para transferir uma parte considerável de probabilidade entre duas posições é $(\Delta X)^2$ uma vez que a largura cresce com proporcionalmente a $\sqrt{t}$.

- O tempo de equilibração da matriz de Markov, é o tempo que demora a atingir o estado assimptótico, pelos argumentos apresentados, podemos concluir que este tempo de equilibração deverá escalar no caso difusivo com $N^2$, ou seja, o quadrado do número de posições possíveis na caixa.

- Para um processo com velocidade, imaginamos que o estado assimptótico deverá ser localizado numa das extremidades, o tempo necessário para transferir probabilidade entre duas regiões deverá escalar com $\Delta X$ e o tempo de equilibração deverá escalar com $N$.

Para o passeio aleatório com probabilidade de transição constante ao longo da posição e com o caminhante preso numa caixa podemos resolver exactamente este problema.

Consideremos a equação mestra do passeio aleatório discreto numa caixa limitada

$$\left\{\begin{array}{lcl} p_0(t+1) & = & p_L P_1(t) + (1-p_R)P_0(t) \\ P_k(t+1) & = & p_L P_{k+1}(t) + p_R P_{k-1}(t) + (1-p_R-p_L)P_k(t) \qquad 0<k<N \\ p_N(t+1) & = & p_R P_{N-1}(t) + (1-p_L)P_N(t) \end{array}\right. \tag{2}$$

onde o caminhante apenas pode ter posições $0 \leq k \leq N$. Como já vimos, este é um processo de Markov uma vez que a evolução não depende do tempo, deste modo a distribuição de probabilidade no instante $t$ é dada a partir da distribuição inicial por,

$$P_k(t) = \left[\Omega^t\right]_{kj} P_j(0)$$

onde $\Omega^t$ é a matriz de Markov $\Omega$ levantada à potência $t$. Para o caso em estudo,

$$\Omega = \begin{pmatrix} 1-p_R & p_L & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ p_R & 1-p_R-p_L & p_L & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p_R & 1-p_R-p_L & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1-p_R-p_L & p_L & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & p_R & 1-p_R-p_L & p_L \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & p_R & 1-p_L \end{pmatrix}$$

podemos procurar soluções próprias da dinâmica (vectores próprios à direita), em que

$$\Omega_{ij}\phi_j = \lambda\phi_i$$

para este caso o sistema 2 converte-se em

$$\left\{\begin{array}{lcl} \lambda\phi_0 & = & p_L\phi_1 + (1-p_R)\phi_0 \\ \lambda\phi_k & = & p_L\phi_{k+1} + p_R\phi_{k-1} + (1-p_R-p_L)\phi_k \qquad 0<k<N \\ \lambda\phi_N & = & p_R\phi_{N-1} + (1-p_L)\phi_N \end{array}\right.$$

e necessitamos de determinar os valores de lambda para os quais este sistema é homogéneo permitindo solução não triviais ($\phi_k = 0 \quad \forall k$). Repare-se que com excepção das equações das extremidades as equações têm simetria de translação na posição. Iremos tentar encontrar funções próprias para o sistema de dimensão infinita na expectativa de que com combinações destas seja possível respeitar as condições fronteira do sistema finito. Para um sistema com simetria de translação as soluções deverão ser do tipo:

$$\phi_l = A\eta^l e^{ikl}$$

para o sistema infinito a relação de dispersão é

$$\lambda(k) = 1 + p_L(\eta e^{ik} - 1) + p_R(\frac{e^{-ik}}{\eta} - 1).$$

Se questionarmos a que relação têm que satisfazer dois valores de $k$ e $q$ de modo a terem o mesmo valor de $\lambda$, verificamos que

$$\lambda(\eta, k) = \lambda(\mu, q) \Leftrightarrow \left(\frac{p_L}{p_R} - \eta\mu e^{i(q+k)}\right)\left(1 - \frac{\mu}{\eta}e^{-i(k-q)}\right) = 0$$

como as probabilidades de transição são reais,

$$\left(q = -k \wedge \frac{p_R}{p_L} = \eta\mu\right) \vee \left(q = k \wedge \mu = \eta\right).$$

**Se** $q = k \wedge \mu = \eta$

Neste caso, se fixarmos as condições fronteira, obtemos,

$$\begin{cases} \left(p_L - p_R\frac{e^{-ik}}{\eta}\right)A & = & 0 \\ \left(p_R - \eta e^{ik}p_L\right)A\eta^N e^{ikN} & = & 0 \end{cases}$$

como queremos soluções tais que $A \neq 0$, podemos concluir que $p_L/p_R = \exp(-ik)/\eta$. Como $p_L/p_R$ é real, necessariamente concluímos que $k = 0$ e $\eta = p_R/p_L$. Deste modo

$$\begin{aligned} \lambda &= 1 \\ \phi_l &= \frac{1 - p_R/p_L}{1 - (p_R/p_L)^{N+1}}\left(\frac{p_R}{p_L}\right)^l \end{aligned}$$

uma vez que esta solução deverá ser normalizada (corresponde ao valor próprio $\lambda = 1$) .

**Se** $q = -k \wedge p_R/p_L = \eta\mu$

Com esta restrição, podemos escrever os coeficientes,

$$\begin{aligned} 1 - p_R - \lambda &= p_L\left(1 - \eta e^{ik} - \mu e^{-ik}\right) \\ 1 - p_L - \lambda &= p_R\left(1 - \frac{e^{ik}}{\mu} - \frac{e^{-ik}}{\eta}\right) \end{aligned}$$

e como podem existir duas funções próprias do tipo $\eta e^{ikl}$ com o mesmo valor próprio $\lambda$ iremos tentar respeitar as condições fronteira com uma combinação linear de ambas,

$$\phi_l = A\eta^l e^{ikl} + B\mu^l e^{-ikl}.$$

Note-se que já incluímos explicitamente que a restrição $q = -k$ por isso apenas temos que recordar que $\eta\mu = p_R/p_L$. Convém também notar que para que faça sentido esta combinação ser usada devemos exigir $k \neq l\pi$ para qualquer valor inteiro de $l$. Caso seja possível satisfazer as condições fronteira com esta função significa que encontramos a forma geral dos vectores próprios à direita para esta matriz de Markov. Deste modo as condições fronteira para esta função são dadas por,

$$\left\{ \begin{array}{rcl} A\left(1-\mu e^{-ik}\right) + \left(1-\eta e^{ik}\right)B & = & 0 \\ A\eta^N e^{ikN}\left(1-\frac{e^{ik}}{\mu}\right) + B\mu^N e^{-ikN}\left(1-\frac{e^{-ik}}{\eta}\right) & = & 0 \end{array} \right.$$

para obtermos soluções para $(A, B)$ diferentes de zero deveremos impor que o sistema de equações seja degenerado e exigir o anulamento do determinante,

$$\det \left| \begin{array}{cc} \left(1-\mu e^{-ik}\right) & \left(1-\eta e^{ik}\right) \\ \eta^N e^{ikN}\left(1-\frac{e^{ik}}{\mu}\right) & \mu^N e^{-ikN}\left(1-\frac{e^{-ik}}{\eta}\right) \end{array} \right| = 0 \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{rcl} \left(\frac{\mu}{\eta}\right)^{N+1} \cos\left(2k(N+1)\right) & = & 1 \\ \sin\left(2k(N+1)\right) & = & 0 \end{array} \right. .$$

A condição do anulamento do seno implica a quantificação dos valores $k = \pi l/2/(N+1)\, l \in \mathbb{Z}$, que naturalmente aponta para o número discreto de valores/vectores próprios da matriz. Analisando a condição do cosseno e incorporando a restrição $\mu = (p_R/p_L)/\eta$, obtemos

$$\left(\frac{p_R}{\eta^2 p_L}\right)^{N+1} (-1)^l = 1,$$

que apenas pode ser verificada para $l$ par. Deste modo, concluímos que

$$\begin{array}{rcl} k & = & \frac{\pi l}{N+1} \qquad l \in \mathbb{Z} \\ \eta & = & \sqrt{\frac{p_R}{p_L}} \wedge \mu = \sqrt{\frac{p_R}{p_L}}. \end{array}$$

Repare-se que $\lambda(k)$ é uma função periódica em $k$ e como tal apenas faz sentido restringirmo-nos a valores $0 < l < N+1$ (já discutimos que para esta restrição $k \neq l\pi$).

## 4.1 Solução e discussão dos resultados

Logo as soluções são da forma

$$\begin{aligned}
\lambda_m &= 1 - p_L - p_R + 2\sqrt{p_L p_R}\cos\left(\frac{m\pi}{N+1}\right) \\
\phi_l^m &= A\left(\frac{p_R}{p_L}\right)^{l/2}\left(\sin\left(\frac{lm\pi}{N+1}\right) - \sqrt{\frac{p_R}{p_L}}\sin\left(\frac{m(l+1)\pi}{N+1}\right)\right)
\end{aligned}$$

para $0 > m > N+1$ e a distribuição assimptótica é caracterizada por,

$$\begin{aligned}
\lambda_0 &= 1 \\
\phi_l^0 &= \frac{1 - p_R/p_L}{1 - (p_R/p_L)^{N+1}}\left(\frac{p_R}{p_L}\right)^l,
\end{aligned}$$

ou seja, uniforme dentro da caixa.

### Caso difusivo

Neste caso $p = p_R = p_L$ o que implica que

$$\begin{aligned}
\lambda_m &= 1 - 2p\left(1 - \cos\left(\frac{m\pi}{N+1}\right)\right) \\
\phi_l^m &= A\cos\left(\frac{m\pi}{N+1}\left(l + \frac{1}{2}\right)\right)
\end{aligned}$$

o que para $m = 0$ origina o valor próprio $\lambda = 1$ e uma distribuição assimptótica uniforme. O tempo de decaimento para $N$ grande é dado por

$$\tau = -\frac{1}{\ln\lambda_1} \approx \frac{(N+1)^2}{p^2\pi^2}$$

conforme tínhamos intuído.

### Evolução com velocidade

Neste caso a distribuição assimptótica está localizada exponencialmente numa das extremidades, numa região da ordem de $\Delta X = |\log(p_R/p_L)|$, que com as probabilidades fixas não depende do tamanho da caixa e naturalmente em unidades intensivas ficará cada vez mais pequena com o aumento do tamanho da caixa. O tempo necessário para equilibrar é dado por

$$\tau = -\frac{1}{\ln\lambda_1} \approx \frac{1}{\ln\left(1 - (\sqrt{p_R} + \sqrt{p_L})^2\right)} + O(1/N^2).$$

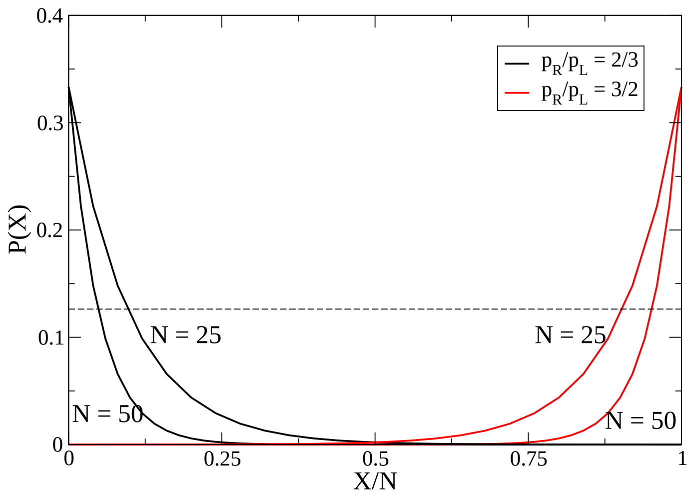


Figura 3: Na figura estão representadas as distribuições assimptóticas para o caso $p_R/p_L = 2/3$ e $p_R/p_L = 3/2$. A tracejado está representada a altura que define o comprimento de localização de cada uma das distribuições (a intercepção com as distribuições é feita a uma distância $\Delta X/N$ da extremidade).

Este resultado parece entrar em contradição com a intuição de ser necessário um tempo proporcional ao tamanho do sistema. Se reflectirmos com um pouco mais de detalhe, concluímos que este caso é completamente diferente da dinâmica difusiva. Na dinâmica difusiva, o estado assimptótico é uma distribuição uniforme, logo, o tempo que demora a atingir o equilíbrio é razoavelmente independente da distribuição inicial (uma vez que a probabilidade tem que se espalhar por toda a caixa). Neste caso o tempo de equilíbrio deve ser fortemente dependente da distribuição inicial. Se a distribuição inicial for localizada na mesma região $\Delta X$ da distribuição assimptótica (independente de $N$) o tempo de relaxação não deverá depender de $N$, contudo se estiver localizada na outra extremidade da caixa, deveremos esperar um tempo da ordem de $N$ para o sistema relaxar. Podemos expressar esta intuição por

$$\tau \propto X_N - X_i$$

onde $X_i$ é a posição onde está localizada a distribuição inicial e supusemos que $p_R > p_L$. Imediatamente deparamos com o problema de termos um tempo de relaxação que depende fortemente da posição inicial, informação esta que não pode estar contida em nenhum valor próprio (os valores próprios não têm nenhuma informação sobre a condição inicial!).

Seja $k_\alpha = \alpha\pi/(N+1)$, o vector próprio à esquerda é dados por,

$$l_m^\alpha = B \begin{cases} \left(\frac{p_L}{p_R}\right)^{m/2} \left(\sqrt{\frac{p_L}{p_R}} \sin\left(mk_\alpha\right) - \sin\left((m+1)k_\alpha\right)\right) & \alpha \neq 0 \\ 1 & \alpha = 0 \end{cases}$$

e o vector próprio à direita $r_m^\alpha = \phi_m^\alpha$. O produto entre os vectores próprios é dado por

$$r_m^\alpha l_m^\alpha = AB \begin{cases} \left(\frac{p_R}{p_L}\right)^m & \alpha = 0 \\ \sqrt{\frac{p_L}{p_R}} \sin^2\left(k_\alpha m\right) + \sqrt{\frac{p_R}{p_L}} \sin^2\left(k_\alpha (m+1)\right) - 2\sin\left(k_\alpha m\right)\sin\left(k_\alpha (l+1)\right) & \alpha \neq 0 \end{cases}$$

e somando,

$$n_\alpha = \sum_{m=0}^{N} r_m^\alpha l_m^\alpha = AB \begin{cases} \frac{1-(p_R/p_L)^{N+1}}{1-p_R/p_L} & \alpha = 0 \\ \frac{N+1}{2}\left(\sqrt{\frac{p_L}{p_R}} + \sqrt{\frac{p_R}{p_L}} - 2\cos\left(k_\alpha\right)\right) & \alpha \neq 0 \end{cases}.$$

Considerando a distribuição inicial concentrada numa única posição, $P_i(0) = \delta_{ik}$, podemos estudar o modo como evoluí no tempo

$$P_m(t) = \frac{1 - p_R/p_L}{1 - (p_R/p_L)^{N+1}} \left(\frac{p_R}{p_L}\right)^m + \sum_{\alpha=1}^{N} \frac{l_k^\alpha r_i^\alpha}{n_\alpha} \lambda_\alpha^t,$$

onde separamos a distribuição assimptótica das parcelas que decaem no tempo ($0 < \lambda_\alpha < 1$ para $\alpha \neq 0$). Analisando cada uma das parcelas,

$$\frac{l_k^\alpha r_i^\alpha}{n_\alpha} \lambda_\alpha^t = f(k,i,\alpha) \exp\left(\frac{i-j}{2} \log\left(\frac{p_R}{p_L}\right) - \log\left(\frac{1}{\lambda_\alpha}\right) t\right)$$

onde a função $f(k,i,\alpha)$ é uma função lentamente variável. O tempo característico para cada modo é dado por,

$$\tau = \frac{(i-j)\log(p_R/p_L)}{2\log(1/\lambda_\alpha)}$$

como tínhamos previsto.