Convergência fina de sistemas de particulas

Rodrigo Marinho

rodrigo.marinho@tecnico.ulisboa.pt

com Patricia Gonçalves (IST), Milton Jara (IMPA) e Otávio Menezes (PURDUE)

IST, Universidade de Lisboa

20 de Maio de 2021

Introdução

- $\{X_t; t \geq 0\}$: cadeia de Markov irredutivel, em tempo continuo;

Introdução

- $\{X_t; t \geq 0\}$: cadeia de Markov irredutivel, em tempo continuo;
- Ω: espaço de estados;

Introdução

- $\{X_t; t \geq 0\}$: cadeia de Markov irredutivel, em tempo continuo;
- Ω: espaço de estados;
- $\mathcal{L}f(x) = \sum_{y \in \Omega} r(x,y)(f(y) - f(x))$: gerador;

Introdução

- $\{X_t; t \geq 0\}$: cadeia de Markov irredutivel, em tempo continuo;
- Ω: espaço de estados;
- $\mathcal{L}f(x) = \sum_{y\in\Omega} r(x,y)(f(y) - f(x))$: gerador;
- $\mu_t = \mathbb{P}(X_t \in \cdot)$;

Introdução

- $\{X_t; t \geq 0\}$: cadeia de Markov irredutivel, em tempo continuo;
- Ω: espaço de estados;
- $\mathcal{L}f(x) = \sum_{y \in \Omega} r(x,y)(f(y) - f(x))$: gerador;
- $\mu_t = \mathbb{P}(X_t \in \cdot)$;
- μ_{ss}: medida estacionária;

Introdução

- $\{X_t; t \geq 0\}$: cadeia de Markov irredutivel, em tempo continuo;
- Ω: espaço de estados;
- $\mathcal{L}f(x) = \sum_{y \in \Omega} r(x,y)(f(y) - f(x))$: gerador;
- $\mu_t = \mathbb{P}(X_t \in \cdot)$;
- μ_{ss}: medida estacionária;

- $d(t) = \|\mu_t - \mu_{ss}\|_{TV} = \frac{1}{2} \sum_{x \in \Omega} |\mu_t(x) - \mu_{ss}(x)|$.

Introdução

- $\{X_t; t \geq 0\}$: cadeia de Markov irredutivel, em tempo continuo;
- Ω: espaço de estados;
- $\mathcal{L}f(x) = \sum_{y\in\Omega} r(x,y)(f(y) - f(x))$: gerador;
- $\mu_t = \mathbb{P}(X_t \in \cdot)$;
- μ_{ss}: medida estacionária;

- $d(t) = \|\mu_t - \mu_{ss}\|_{TV} = \frac{1}{2}\sum_{x\in\Omega} |\mu_t(x) - \mu_{ss}(x)|$.

Queremos estimar $d(t)$.

Desigualdade log-Sobolev

Uma das técnicas para limitar superiormente a função $d(t)$ é baseada na desigualdade log-Sobolev:

Desigualdade log-Sobolev

Uma das técnicas para limitar superiormente a função $d(t)$ é baseada na desigualdade log-Sobolev:

$$\int f \log f d\mu_{ss} \leq C \underbrace{\int \underbrace{\sum_y r(x,y)\left(\sqrt{f(y)} - \sqrt{f(x)}\right)^2}_{\Gamma\sqrt{f}(x)} \mu_{ss}(dx)}_{\mathcal{D}(\sqrt{f})}$$

para qualquer densidade f com respeito a μ_{ss}.

Desigualdade log-Sobolev

Uma das técnicas para limitar superiormente a função $d(t)$ é baseada na desigualdade log-Sobolev:

$$\int f \log f d\mu_{ss} \leq C \underbrace{\int \underbrace{\sum_y r(x,y)\left(\sqrt{f(y)} - \sqrt{f(x)}\right)^2}_{\Gamma\sqrt{f}(x)} \mu_{ss}(dx)}_{\mathcal{D}(\sqrt{f})}$$

para qualquer densidade f com respeito a μ_{ss}.

- Γ e $\mathcal{D}$ são conhecidos como *carré du champ* e *forma de Dirichlet*, respectivamente.

Desigualdade log-Sobolev

Uma das técnicas para limitar superiormente a função $d(t)$ é baseada na desigualdade log-Sobolev:

$$\int f \log f d\mu_{ss} \leq C \underbrace{\int \underbrace{\sum_y r(x,y)\left(\sqrt{f(y)} - \sqrt{f(x)}\right)^2}_{\Gamma\sqrt{f}(x)} \mu_{ss}(dx)}_{\mathcal{D}(\sqrt{f})}$$

para qualquer densidade f com respeito a μ_{ss}.

- Γ e $\mathcal{D}$ são conhecidos como *carré du champ* e *forma de Dirichlet*, respectivamente.
- A constante log-Sobolev K_{LS} é a maior constante cujo inverso satisfaz a desigualdade log-Sobolev acima.

Desigualdade log-Sobolev

- Mas o que isso tem a ver com $d(t)$?

Desigualdade log-Sobolev

- Mas o que isso tem a ver com $d(t)$? Para responder essa questão definamos
- $f_t(x) = \frac{\mu_t(x)}{\mu_{ss}(x)}$

Desigualdade log-Sobolev

- Mas o que isso tem a ver com $d(t)$? Para responder essa questão definamos
- $f_t(x) = \frac{\mu_t(x)}{\mu_{ss}(x)}$ e
- $h(t) := \int f_t \log f_t d\mu_{ss}$.

Desigualdade log-Sobolev

- Mas o que isso tem a ver com $d(t)$? Para responder essa questão definamos
- $f_t(x) = \frac{\mu_t(x)}{\mu_{ss}(x)}$ e
- $h(t) := \int f_t \log f_t d\mu_{ss}$.

A desigualdade de Yau diz que

$$h'(t) \leq -\mathcal{D}(\sqrt{f_t}).$$

Desigualdade log-Sobolev

- Mas o que isso tem a ver com $d(t)$? Para responder essa questão definamos
- $f_t(x) = \frac{\mu_t(x)}{\mu_{ss}(x)}$ e
- $h(t) := \int f_t \log f_t d\mu_{ss}$.

A desigualdade de Yau diz que

$$h'(t) \leq -\mathcal{D}(\sqrt{f_t}).$$

Assim, se combinarmos a desigualdade de Yau com a desigualdade log-Sobolev, obtemos

$$h'(t) \leq -K_{LS} h(t).$$

Desigualdade log-Sobolev

- Mas o que isso tem a ver com $d(t)$? Para responder essa questão definamos
- $f_t(x) = \frac{\mu_t(x)}{\mu_{ss}(x)}$ e
- $h(t) := \int f_t \log f_t d\mu_{ss}$.

A desigualdade de Yau diz que

$$h'(t) \leq -\mathcal{D}(\sqrt{f_t}).$$

Assim, se combinarmos a desigualdade de Yau com a desigualdade log-Sobolev, obtemos

$$h'(t) \leq -K_{LS} h(t).$$

Consequentemente,

$$h(t) \leq h(0) e^{-K_{LS} t}.$$

Desigualdade log-Sobolev

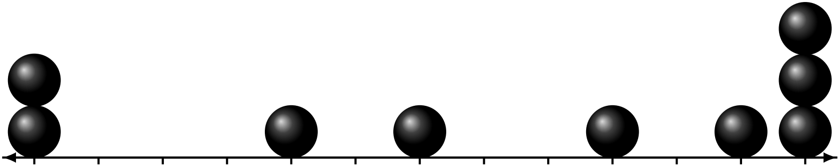
Como a desigualdade de Pinsker diz que

$$d(t) = \|\mu_t - \mu_{ss}\|_{TV} \leq \sqrt{h(t)},$$

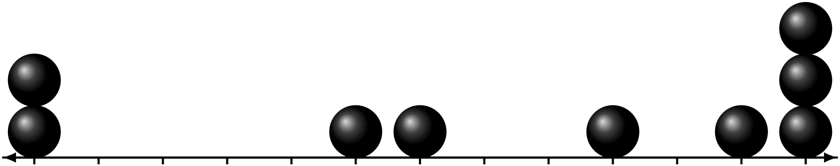
concluimos

$$d(t) \leq \sqrt{h(0)}e^{-K_{LS}t/2}.$$

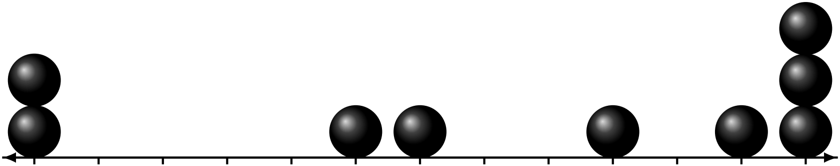
Processo de exclusão com reservatórios



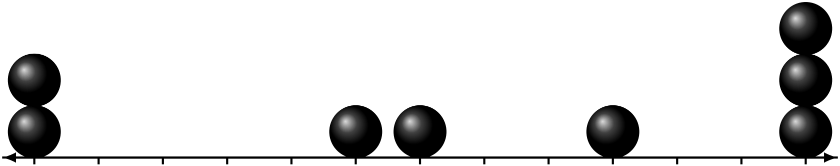
Processo de exclusão com reservatórios



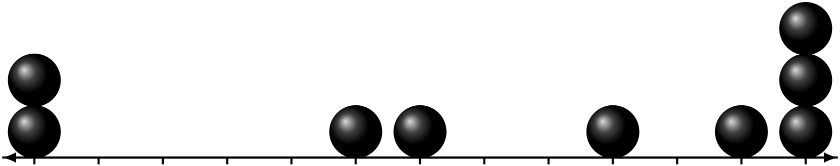
Processo de exclusão com reservatórios



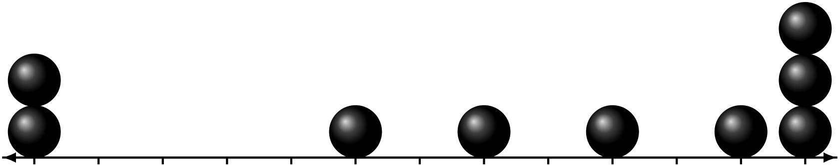
Processo de exclusão com reservatórios



Processo de exclusão com reservatórios



Processo de exclusão com reservatórios



Processo de exclusão com reservatórios

- $n \in \{2, 3, \dots, \}$: parâmetro de escala;

Processo de exclusão com reservatórios

- $n \in \{2, 3, \ldots, \}$: parâmetro de escala;
- $\Lambda_n := \{1, \ldots, n-1\}$: intervalo discreto com $n - 1$ pontos;

Processo de exclusão com reservatórios

- $n \in \{2, 3, \ldots, \}$: parâmetro de escala;
- $\Lambda_n := \{1, \ldots, n-1\}$: intervalo discreto com $n-1$ pontos;
- $\{1, n-1\}$: *fronteira* de Λ_n;

Processo de exclusão com reservatórios

- $n \in \{2, 3, \dots, \}$: parâmetro de escala;
- $\Lambda_n := \{1, \dots, n-1\}$: intervalo discreto com $n-1$ pontos;
- $\{1, n-1\}$: *fronteira* de Λ_n;
- $\Omega_n := \{0, 1\}^{\Lambda_n}$: espaço de configurações
- $\eta \in \Omega_n$: configuração de particulas;

Processo de exclusão com reservatórios

- $n \in \{2, 3, \ldots, \}$: parâmetro de escala;
- $\Lambda_n := \{1, \ldots, n-1\}$: intervalo discreto com $n-1$ pontos;
- $\{1, n-1\}$: *fronteira* de Λ_n;
- $\Omega_n := \{0, 1\}^{\Lambda_n}$: espaço de configurações
- $\eta \in \Omega_n$: configuração de particulas;
- Diremos que $x \in \Lambda_n$ está ocupado por uma particula (resp. vazio) na configuração $\eta \in \Omega_n$ se $\eta(x) = 1$ (resp. $\eta(x) = 0$).

Processo de exclusão com reservatórios

- $n \in \{2, 3, \dots, \}$: parâmetro de escala;
- $\Lambda_n := \{1, \dots, n-1\}$: intervalo discreto com $n-1$ pontos;
- $\{1, n-1\}$: *fronteira* de Λ_n;
- $\Omega_n := \{0, 1\}^{\Lambda_n}$: espaço de configurações
- $\eta \in \Omega_n$: configuração de particulas;
- Diremos que $x \in \Lambda_n$ está ocupado por uma particula (resp. vazio) na configuração $\eta \in \Omega_n$ se $\eta(x) = 1$ (resp. $\eta(x) = 0$).
- Consideraremos os processo em equilibrio, isto é, ambos os reservatórios criam particulas com taxa $\rho \in (0, 1)$ e destroem particulas com taxa $1 - \rho$;

Processo de exclusão com reservatórios

- $n \in \{2, 3, \ldots, \}$: parâmetro de escala;
- $\Lambda_n := \{1, \ldots, n-1\}$: intervalo discreto com $n-1$ pontos;
- $\{1, n-1\}$: *fronteira* de Λ_n;
- $\Omega_n := \{0, 1\}^{\Lambda_n}$: espaço de configurações
- $\eta \in \Omega_n$: configuração de particulas;
- Diremos que $x \in \Lambda_n$ está ocupado por uma particula (resp. vazio) na configuração $\eta \in \Omega_n$ se $\eta(x) = 1$ (resp. $\eta(x) = 0$).
- Consideraremos os processo em equilibrio, isto é, ambos os reservatórios criam particulas com taxa $\rho \in (0, 1)$ e destroem particulas com taxa $1 - \rho$;
- $\{\eta_t; t \geq 0\}$: processo de exclusão com reservatórios, no equilibrio.

Processo de exclusão com reservatórios

- Gerador:

$$\mathfrak{L}_n f(\eta) := n^2 \sum_{x=1}^{n-2} \nabla_{x,x+1} f(\eta) + n^2 \sum_{x\in\{1,n-1\}} \big(\rho(1-\eta(x)) + (1-\rho)\eta(x)\big) \nabla_x f(\eta),$$

Processo de exclusão com reservatórios

- Gerador:

$$\mathfrak{L}_n f(\eta) := n^2 \sum_{x=1}^{n-2} \nabla_{x,x+1} f(\eta) + n^2 \sum_{x\in\{1,n-1\}} \big(\rho(1-\eta(x)) + (1-\rho)\eta(x)\big) \nabla_x f(\eta),$$

- $\nabla_{x,y} f(\eta) = f(\eta^{x,y}) - f(\eta), \quad \nabla_x f(\eta) = f(\eta^x) - f(\eta),$

$$\eta^{x,y}(z) = \begin{cases} \eta(x) & \text{if } z = y, \\ \eta(y) & \text{if } z = x, \\ \eta(z) & \text{if } z \neq x, y \end{cases}$$

e

$$\eta^{x}(z) = \begin{cases} 1-\eta(x) & \text{if } z = x, \\ \eta(z) & \text{if } z \neq x. \end{cases}$$

Processo de exclusão com reservatórios

- $\nu^n_{u(\cdot)}$: medida Bernoulli produto associada ao perfil $u : \Lambda_n \to [0,1]$:

$$\nu^n_{u(\cdot)}(\eta) = \prod_{x \in \Lambda_n} \{\eta(x)u(x) + (1-\eta(x))(1-u(x))\};$$

Processo de exclusão com reservatórios

- $\nu^n_{u(\cdot)}$: medida Bernoulli produto associada ao perfil $u : \Lambda_n \to [0,1]$:

$$\nu^n_{u(\cdot)}(\eta) = \prod_{x \in \Lambda_n} \{\eta(x)u(x) + (1-\eta(x))(1-u(x))\};$$

- No equilibrio, ν^n_ρ é a medida invariante.

Processo de exclusão com reservatórios

- $\nu^n_{u(\cdot)}$: medida Bernoulli produto associada ao perfil $u : \Lambda_n \to [0,1]$:

$$\nu^n_{u(\cdot)}(\eta) = \prod_{x \in \Lambda_n} \{\eta(x)u(x) + (1-\eta(x))(1-u(x))\};$$

- No equilibrio, ν^n_ρ é a medida invariante.

Para cada $\kappa > 0$, $n \in \{2, 3, \dots\}$ e $\varepsilon_0 \in (0, \min\{\rho, 1-\rho\}]$, seja $\mathcal{U}^n_{\kappa,\varepsilon_0}$ a classe das funções $u : \Lambda_n \to [0,1]$ tais que:

- $u(x) \in [\varepsilon_0, 1-\varepsilon_0]$ para qualquer $x \in \Lambda_n$;
- $n|u(x+1) - u(x)| \leq \kappa$ para qualquer $x \in \{1, \dots, n-2\}$.

Processo de exclusão com reservatórios

Nosso primeiro resultado é:

Nosso primeiro resultado é:

Theorem

Sejam $\rho \in (0,1)$, $\varepsilon_0 \in (0, \min\{\rho, 1-\rho\}]$ *e* $\kappa > 0$ *fixos. Existe uma constante positiva* $K_0 = K_0(\rho, \varepsilon_0, \kappa)$ *tal que*

$$H_{\nu^n_{u(\cdot)}}(f) := \int f \log f d\nu^n_{u(\cdot)} \leq \frac{1}{K_0} \int \Gamma_n \sqrt{f} d\nu^n_{u(\cdot)}$$

para qualquer $u \in \mathcal{U}^n_{\varepsilon_0,\kappa}$ *e qualquer densidade* f *com respeito a* $\nu^n_{u(\cdot)}$.

Indo além...

- $u_0 : [0,1] \to [\varepsilon_0, 1-\varepsilon_0]$ tal que $u_0(0) = u_0(1) = \rho$;

Indo além...

- $u_0 : [0,1] \to [\varepsilon_0, 1-\varepsilon_0]$ tal que $u_0(0) = u_0(1) = \rho$;
- $u_0^n(x) = u_0(x/n)$;

Indo além...

- $u_0 : [0,1] \to [\varepsilon_0, 1-\varepsilon_0]$ tal que $u_0(0) = u_0(1) = \rho$;
- $u_0^n(x) = u_0(x/n)$;
- $\mu_0^n = \nu^n_{u_0^n(\cdot)}$: medida inicial;

Indo além...

- $u_0 : [0,1] \to [\varepsilon_0, 1-\varepsilon_0]$ tal que $u_0(0) = u_0(1) = \rho$;
- $u_0^n(x) = u_0(x/n)$;
- $\mu_0^n = \nu^n_{u_0^n(\cdot)}$: medida inicial;
- $\mu_t^n = \mathbb{P}(\eta_t \in \cdot)$;

Indo além...

- $u_0 : [0,1] \to [\varepsilon_0, 1-\varepsilon_0]$ tal que $u_0(0) = u_0(1) = \rho$;
- $u_0^n(x) = u_0(x/n)$;
- $\mu_0^n = \nu^n_{u_0^n(\cdot)}$: medida inicial;
- $\mu_t^n = \mathbb{P}(\eta_t \in \cdot)$;
- ν: medida de probabilidade em Ω_n;

Indo além...

- $u_0 : [0,1] \to [\varepsilon_0, 1-\varepsilon_0]$ tal que $u_0(0) = u_0(1) = \rho$;
- $u_0^n(x) = u_0(x/n)$;
- $\mu_0^n = \nu^n_{u_0^n(\cdot)}$: medida inicial;
- $\mu_t^n = \mathbb{P}(\eta_t \in \cdot)$;
- ν: medida de probabilidade em Ω_n;
- $f_t^n(\eta) = \frac{\mu_t^n(\eta)}{\nu(\eta)}$.

Indo além...

- $u_0 : [0,1] \to [\varepsilon_0, 1-\varepsilon_0]$ tal que $u_0(0) = u_0(1) = \rho$;
- $u_0^n(x) = u_0(x/n)$;
- $\mu_0^n = \nu^n_{u_0^n(\cdot)}$: medida inicial;
- $\mu_t^n = \mathbb{P}(\eta_t \in \cdot)$;
- ν: medida de probabilidade em Ω_n;
- $f_t^n(\eta) = \frac{\mu_t^n(\eta)}{\nu(\eta)}$.

$$\Big| \|\mu_t^n - \nu_\rho^n\|_{TV} - \|\nu - \nu_\rho^n\|_{TV} \Big| \leq \|\mu_t^n - \nu\|_{TV} \leq \sqrt{H_\nu(f_t^n)}.$$

Escolhendo ν

- Para cada $t \geq 0$ definamos $u_t^n : \{0, 1, \dots, n\} \to [0, 1]$ como

$$u_t^n(x) := \begin{cases} \mathbb{E}_{\mu_0^n}[\eta_t(x)] & \text{if } \; x \in \Lambda_n, \\ \rho & \text{if } \; x \in \{0, n\}. \end{cases}$$

Escolhendo ν

- Para cada $t \geq 0$ definamos $u_t^n : \{0, 1, \ldots, n\} \to [0, 1]$ como

$$u_t^n(x) := \begin{cases} \mathbb{E}_{\mu_0^n}[\eta_t(x)] & \text{if } \; x \in \Lambda_n, \\ \rho & \text{if } \; x \in \{0, n\}. \end{cases}$$

- Δ_n: Laplaciano discreto definido por

$$\Delta_n f(x) = n^2 \big(f(x+1) + f(x-1) - 2f(x) \big)$$

para qualquer $x \in \Lambda_n$;

Escolhendo ν

- Para cada $t \geq 0$ definamos $u_t^n : \{0, 1, \ldots, n\} \to [0, 1]$ como

$$u_t^n(x) := \begin{cases} \mathbb{E}_{\mu_0^n}[\eta_t(x)] & \text{if } \; x \in \Lambda_n, \\ \rho & \text{if } \; x \in \{0, n\}. \end{cases}$$

- Δ_n: Laplaciano discreto definido por

$$\Delta_n f(x) = n^2 \big(f(x+1) + f(x-1) - 2f(x) \big)$$

para qualquer $x \in \Lambda_n$;

- Pela fórmula de Dynkin, $\{u_t^n; t \geq 0\}$ é a única solução do problema de fronteira

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} u_t^n(x) = \Delta_n u_t^n(x) & \text{for } \; t \geq 0 \text{ and } x \in \Lambda_n, \\ u_t^n(x) = \rho & \text{for } \; t \geq 0 \text{ and } x \in \{0, n\}, \\ u_0^n(x) = u_0\left(\frac{x}{n}\right) & \text{for } \; x \in \Lambda_n. \end{cases}$$

Escolhendo ν

- A *conservação do equilibrio local* diz que para qualquer $t \geq 0$ fixo, as medidas μ_t^n and $\nu^n_{u_t^n(\cdot)}$ estão próximas quando $n \to \infty$, se observadas em um intervalo de Λ_n de tamanho fixo.

Escolhendo ν

- A *conservação do equilibrio local* diz que para qualquer $t \geq 0$ fixo, as medidas μ_t^n and $\nu^n_{u_t^n(\cdot)}$ estão próximas quando $n \to \infty$, se observadas em um intervalo de Λ_n de tamanho fixo.
- Faz todo sentido escolher $\nu^n_{u_t^n(\cdot)}$ como a medida de referência desejada.

Escolhendo ν

- A *conservação do equilibrio local* diz que para qualquer $t \geq 0$ fixo, as medidas μ_t^n and $\nu^n_{u_t^n(\cdot)}$ estão próximas quando $n \to \infty$, se observadas em um intervalo de Λ_n de tamanho fixo.
- Faz todo sentido escolher $\nu^n_{u_t^n(\cdot)}$ como a medida de referência desejada.
- De fato, utilizando cálculo de correlações e a desigualdade log-Sobolev supracitada, mostramos que a entropia relativa decai exponencialmente rápido.

Escolhendo ν

- A *conservação do equilibrio local* diz que para qualquer $t \geq 0$ fixo, as medidas μ_t^n and $\nu^n_{u_t^n(\cdot)}$ estão próximas quando $n \to \infty$, se observadas em um intervalo de Λ_n de tamanho fixo.
- Faz todo sentido escolher $\nu^n_{u_t^n(\cdot)}$ como a medida de referência desejada.
- De fato, utilizando cálculo de correlações e a desigualdade log-Sobolev supracitada, mostramos que a entropia relativa decai exponencialmente rápido.
- Estimando a distância entre as medidas Bernoulli produto, concluimos o seguinte:

Resultado final

Theorem

Seja $u_0 : [0,1] \to [0,1]$ *diferenciável. Assuma que* $u_0(0) = u_0(1) = \rho$ *e que* $u_0(x) \in (0,1)$ *para todo* $x \in [0,1]$*. Seja* $c_\ell(u_0) := \int u_0(x)\sin(\pi \ell x)dx$ *o coeficiente de Fourier de ordem* $\ell \in \mathbb{N}$ *do perfil inicial* u_0*. Seja* $\ell_0 \in \mathbb{N}$ *o menor inteiro tal que* $c_{\ell_0}(u_0) \neq 0$*. Para qualquer* $b \in \mathbb{R}$*,*

$$\lim_{n\to\infty} \left\| \mu^n_{\frac{1}{2\pi^2\ell_0^2}\log n + \frac{1}{\pi^2\ell_0^2} b} - \nu^n_\rho \right\|_{TV} = \mathcal{G}(\gamma e^{-b}),$$

onde $\gamma := \frac{|c_{\ell_0}(u_0)|}{\sqrt{2\rho(1-\rho)}}$ *e* $\mathcal{G} : \mathbb{R} \to [0,1]$ *é o perfil Gaussiano definido por*

$$\mathcal{G}(m) := \|\mathcal{N}(m,1) - \mathcal{N}(0,1)\|_{TV} = \frac{1}{2}\mathbb{E}\left[\left|e^{mX - \frac{m^2}{2}} - 1\right|\right] = erf\left(\frac{m}{2\sqrt{2}}\right),$$

onde X *é uma variável aleatória com lei* $\mathcal{N}(0,1)$ *e erf é a função erro de Gauss*

$$erf(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-x}^{x} e^{-t^2} dt.$$

Obrigado pela atenção!

European Research Council

Established by the European Commission