**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS**

Julian Andres Jaimes Santamaria

Extensão do modelo Rase and Peel

São Carlos
2011

Julian Andres Jaimes Santamaria

Extensão do modelo Raise and Peel

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física do Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo, para a obtenção do título de Mestre em Ciências.

Área de Concentração: Física Básica
Orientador: Prof. Dr. Francisco Castilho Alcaraz

Versão Original

São Carlos
2011

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

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Biblioteca e Informação IFSC/USP

Santamaria, Julian Andres Jaimes.

Extensão do modelo Rouse and peel./ Julian Andres Jaimes
Santamaria; orientador Francisco Castilho Alcaraz. -- São Carlos,
2011.

81p.

Dissertação (Mestrado em Ciência - Área de concentração:
Física Básica) – Instituto de Física de São Carlos da Universidade de
São Paulo.

1. Modelos de crescimento. 2. Fenômenos críticos de não
equilíbrio. 3. Processos estocásticos. 4. Dinâmica estocástica de
partículas. 5. Cadeias de spin integráveis. I. Título.

FOLHA DE APROVAÇÃO

Julian Andres Jaimes Santamaria

Dissertação apresentada ao Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo para obtenção do título de Mestre em Ciências.
Área de Concentração: Física Básica.

Aprovado(a) em: 25.07.2011

Comissão Julgadora

Prof(a). Dr(a). Francisco Castilho Alcaraz

Instituição: IFSC/USP

Assinatura

Prof(a). Dr(a). Leonardo Paulo Maia

Instituição: IFSC/USP

Assinatura

Prof(a). Dr(a). Jürgen Fritz Stilck

Instituição: UFF

Assinatura

AGRADECIMENTOS

Agradeço à família pelo apoio. Ao meu orientador pela infinita paciência e apoio nos momentos difíceis. À CAPES pelo financiamento do projeto, e à Porita pelo amor e compreensão.

RESUMO

JAIMES, J. A. *Extensão do modelo Raise and Peel*. 2011. 81p. Dissertação (Mestrado) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2011.

O modelo raise and peel é um modelo estocástico unidimensional com absorção local e desorção não local. O modelo depende de um único parâmetro u que é a razão entre a taxa de absorção pela de desorção. Em um valor especial deste parâmetro ($u = 1$) o modelo tem características interessantes. O espectro é descrito por uma teoria de campos conforme (carga central $c = 0$), sendo que a distribuição de probabilidade estacionária está relacionada a um sistema de equilíbrio em duas dimensões. O diagrama de fases do modelo, como função do parâmetro u , tem uma fase massiva (com lacuna de massa) e uma sem massa (lacuna de massa nula) com expoentes críticos que variam continuamente com o parâmetro u . Nesta dissertação estudamos uma extensão do modelo raise and peel model no ponto $u = 1$, e que depende de um parâmetro adicional p . Surpreendentemente o novo modelo exibe invariância conforme para todo o domínio do seu parâmetro p , e está na mesma classe de universalidade do modelo raise and peel usual ($u = 1$). A única diferença entre os dois modelos é o valor da velocidade do som $v_s(p)$, que agora é função de p . Os métodos que utilizamos nesta dissertação foram diagonalizações exatas do operador de evolução do modelo (Hamiltoniano) para cadeias pequenas e simulações de Monte Carlo.

Palavras-chave: Modelos de crescimento. Fenômenos críticos de não equilíbrio. Processos estocásticos. Dinâmica estocástica de partículas. Cadeias de spin integráveis. Teoria de campo conforme. Invariância conforme. Escala de tamanho finito.

ABSTRACT

JAIMES, J. A. *Extension of the Raise and Peel model*. 2011. 81p. Dissertação (Mestrado) - Instituto de física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2011.

The raise and peel model is a one-dimensional nonlocal stochastic model where adsorption happens locally and desorption is nonlocal. The model depends on the single parameter u that is the ratio among the desorption and adsorption rates. At a special value of this parameter ($u = 1$) the model has interesting features. The spectrum is described by a conformal field theory (central charge $c = 0$), and its stationary probability density is related to the equilibrium distribution of a two dimensional system. The phase diagram of the model, as a function of the parameter u , has a massive phase (gapped phase) and a massless (gapless phase) whose critical exponents vary continuously with u . In this monography we study a one-parameter extension of the raise and peel model at $u = 1$, that depends on the additional parameter p . The new model exhibits conformal invariance for the whole range of values of its parameter p , and it is in the same universality class as the usual raise and peel model. The single difference between the models is the value of the sound velocity $v_s(p)$ which is a function of p . The methods used in this monography are the exact diagonalization of the evolution operator of the stochastic model (Hamiltonian), for small lattice sizes and Monte Carlo simulations.

Keywords: Growth models. Non-equilibrium critical phenomena. Stochastic processes. Stochastic particle dynamics. Integrable spins chains. Conformal Field Theory. Conformal invariance. Finite-size scaling.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - O processo a corresponde a difusão, o processo b a coagulação e o processo c a aniquilação.	20
Figura 2 - Exemplo de interface com 15 sítios ($L = 14$).	23
Figura 3 - Processos de absorção (acima) e adsorção (abaixo), numa rede de tamanho $L = 14$	24
Figura 4 - Estados possíveis para uma rede de tamanho $L = 3$ no modelo de pilha de areia. Círculos brancos indicam ausência de partículas, enquanto que círculos pretos indicam presença de partículas.	32
Figura 5 - Exemplo da dinâmica de um modelo de pilha de Areia com $L = 3$ sítios.	32
Figura 6 - Exemplos de diagramas de loops para $L = 8$ e $L = 6$	34
Figura 7 - Exemplo de interface com 17 sítios ($L = 16$).	36
Figura 8 - Exemplo de correspondência entre as interfaces RSOS e os diagramas de loops.	36
Figura 9 - Trajetórias RSOS no caso de uma rede de tamanho $L = 6$	37
Figura 10 - Figura que mostra duas formas de desorção. Neste caso, o estado $ 2\rangle$ “vai” para o estado $ 1\rangle$ de duas formas diferentes.	39
Figura 11 - Transformação das setas dependendo se o sítio for par ou ímpar	42
Figura 12 - Diagrama equivalente a 2.44.	42
Figura 13 - Correspondência entre os vértices e as ASM.	44
Figura 14 - A função de escala $C\left(\cos(\pi x/L)\right)$, definida em 2.63.	47
Figura 15 - Colapso dos dados do número de aglomerados $\langle k(t, L) \rangle$, para diferentes tamanhos do sistema. Confirma-se nesta curva o valor do expoente crítico dinâmico $z = 1$	48

Figura 16 - Configurações típicas no estado estacionário para $w = 0.00025$, e diferentes tamanhos da rede. $h(x)$ é a altura média no sítio x	48
Figura 17 - Avalanche no modelo de pilha de areia, com condições de fronteira aberta e $h_c = 4$	50
Figura 18 - Valores limites tomados pela variável $n(L)$, em uma rede de tamanho $L = 14$	51
Figura 19 - Diagrama de fase do RPM.	53
Figura 20 - Trajetória de tamanho $L = 14$ como 4 picos. A queda dos blocos representa a ação dos geradores nesse estado.	57
Figura 21 - LE_2 contra $1/L$ para o RPM, para alguns valores do parâmetro u . São mostradas as curvas para $L = 6, 8, 10, \dots, 26$	63
Figura 22 - LE_2 contra $1/L$ para alguns valores do parâmetro p no modelo RPM-p.	64
Figura 23 - Mostra-se à esquerda o número de aglomerados e à direita a altura média como função do tempo. As curvas correspondem ao estado inicial sendo o substrato (preto) e o triângulo (vermelho). Os dados foram obtidos fazendo-se média com 2000 amostras com o valor do parâmetro $p = 0.5$ e a rede com $L = 512$ sítios.	67
Figura 24 - Colapso das funções do número de aglomerados para redes de tamanho $L = 1024, 2048, 4096$ e 8192 , e $p = 0.1, 0.5, 0.9, 1.25, 1.5$ e 1.9	68
Figura 25 - Cálculo do expoente crítico α relativo à distribuição de aglomerados, no caso $p = 0.5$. As redes usadas correspondem a tamanhos que vão desde $L = 1024$ até $L = 32768$	69
Figura 26 - A função $g(x, L)$ em redes de tamanho $L = 1024, 2048, 4098$, e 8192 . O gráfico da esquerda é para $p = 0.5$ e o da direita para 1.5	69
Figura 27 - Valor da constante C em 3.37 para $p = 0.1$ e $p = 0.5$	70
Figura 28 - Valor da constante C em 3.37 para $p = 1.5$ e $p = 1.9$	70
Figura 29 - Sequência que mostra o armazenamento dos dados de uma rede de tamanho $L = 6$ numa tabela de 8 sítios.	80

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 -	Extrapolção dos dados para E_2L . São mostrados os valores obtidos para $v_s(p)$ e a sua relação com $v_s(1) = 3\sqrt{3}/2$, para alguns valores de p	65
Tabela 2 -	O número de aglomerados $K(L)$ no limite $L \rightarrow \infty$, para diferentes valores do parâmetro p	68
Tabela 3 -	Configuração inicial da tabela que armazena os estados.	78

SUMÁRIO

1	Introdução	17
2	O modelo Raise and Peel	27
2.1	Processos Estocásticos Markovianos e a equação Mestra	28
2.2	Álgebras associativas e processos estocásticos	29
2.3	Processo estocástico associado à álgebra de Temperley e Lieb	33
2.4	A álgebra Temperley-Lieb e o modelo Raise and Peel	36
2.5	Descrição do modelo	40
2.5.1	Cadeia quântica de spins e o RPM	40
2.5.2	A conexão do RPM com o modelo FPL e as matrizes de sinal alter- nante	41
2.5.3	Comportamento das flutuações espaciais e temporais no RPM . . .	45
2.5.4	Avalanches e a fase SOC	49
2.5.5	Diagrama de fase do RPM	53
3	Extensão do Modelo Raise and Peel	55
3.1	Descrição do Modelo	55
3.2	Espectro do Hamiltoniano	59
3.3	Espaço e Tempo	65
4	Conclusões	71
	REFERÊNCIAS	73

1 *Introdução*

A distribuição de probabilidade $P(n, t)$ de encontrar um sistema em certa configuração “ n ” no tempo “ t ” dá uma descrição completa de um modelo estocástico. Para sistemas em equilíbrio térmico à temperatura T , esta distribuição é dada pelo ensemble estacionário de Gibbs $P(n) \sim e^{-H(n)/k_B T}$, onde $H(n)$ denota o hamiltoniano microscópico do sistema e k_B a constante de Boltzmann. Em princípio, o ensemble de Gibbs permite calcular o valor esperado de qualquer observável mediante uma soma sobre todas as configurações possíveis do sistema. Embora muitas soluções exatas tenham sido achadas, na maioria dos casos é muito difícil realizar a soma.

Na natureza, a situação do equilíbrio não é a mais comum. Na maioria dos casos a evolução temporal começa desde um estado inicial que está longe do equilíbrio. A relaxação de tal sistema para seu estado estacionário não pode ser descrito pela mecânica estatística do equilíbrio. É preciso então usar um modelo probabilístico para a dinâmica microscópica do sistema. Assumindo certas transições de probabilidade, a distribuição $P(n, t)$ tem que ser derivada de uma equação diferencial como a equação de Fokker-Planck ou a equação mestra.

A equação mestra é uma equação diferencial parcial que descreve a variação temporal da distribuição de probabilidade $P(n, t)$ (ver referência (1))

$$\frac{d}{dt}P(n, t) = \sum_m \{w_{n,m}P(m, t) - w_{m,n}P(n, t)\} , \quad (1.1)$$

onde $w_{n,m}$ é a taxa de transição do estado m para o estado n . Como $dP(n, t)/dt$ é determinada pelo valor atual da distribuição $P(n, t)$, a equação mestra descreve um processo de Markov, i.e. sem memória. Usando notação vetorial, a equação mestra pode ser escrita como:

$$\frac{d}{dt}|P(t)\rangle = -H|P(t)\rangle , \quad (1.2)$$

onde $|P(t)\rangle$ denota um vetor cujas componentes são as probabilidades $P(n, t)$. O operador H (às vezes chamado de operador de Liouville) gera a evolução temporal, e possui

elementos de matriz:

$$H_{n,m} = \delta_{n,m} \sum_c w_{c,n} - w_{n,m} . \quad (1.3)$$

A solução formal da equação mestra é dada por $|P(t)\rangle = e^{-Ht}|P_0\rangle$, onde $|P_0\rangle$ denota a distribuição de probabilidade inicial. Portanto, para determinar $|P(t)\rangle$, o operador H tem que ser diagonalizado, o que em geral é uma tarefa difícil. Em geral, os processos estocásticos são irreversíveis, sendo o operador H não hermitiano.

A equação 1.3 implica que a matriz H tem as seguintes duas propriedades:

$$H_{n,m} \leq 0 \quad \text{para } n \neq m , \quad (1.4)$$

$$\sum_n H_{n,m} = 0 \quad \text{para cada } m . \quad (1.5)$$

Uma matriz que possui essas duas condições é chamada de matriz intensidade.

Os fenômenos de não equilíbrio são também encontrados quando o sistema tem um fluxo externo de energia ou partículas, que o mantém fora do equilíbrio. Estes tipos de sistemas não obedecem ao “balanceamento detalhado” (como os sistemas em equilíbrio), o que faz com que eles apresentem um comportamento mais rico. Porém, sua distribuição de probabilidade não pode ser expressa somente em termos da energia $H(n)$ e a equação mestra tem que ser resolvida. O entendimento teórico dos fenômenos de não equilíbrio, comparado com a mecânica estatística do equilíbrio, está apenas começando.

O fenômeno mais simples de não equilíbrio é aquele em que temos um conjunto de partículas submetidas à uma força aleatória. Um importante exemplo é a equação de Smoluchowski, que descreve a evolução da distribuição de probabilidade para o movimento Browniano de partículas clássicas em um campo externo (ver referência (2)).

Uma situação mais complexa surge em modelos estocásticos de Rede. Um modelo bem conhecido é o modelo de Glauber (3), que descreve a relaxação de um sistema de spins clássicos localizados numa rede indo para o estado estacionário. A distribuição de equilíbrio $P_{eq}(n)$ deste modelo é dada pelo ensemble canônico:

$$P_{eq}(\sigma) = \frac{1}{Z} e^{-H(\sigma)/k_B T} , \quad (1.6)$$

onde $Z = \sum_{\{\sigma\}} e^{-H(\sigma)/k_B T}$ ($\{\sigma\}$ significa que a soma é realizada sobre os possíveis estados dos sistema), e $H(\sigma)$ é o hamiltoniano do modelo de Ising ferromagnético:

$$H(\sigma) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j . \quad (1.7)$$

A soma é realizada entre primeiros vizinhos da rede, J é a constante de acoplamento, e $\sigma_i = \pm 1$ denota o spin no sítio i . O estado de equilíbrio pode ser gerado através de uma equação mestra que mimica o contato do sistema com um banho térmico à temperatura T . A dinâmica do sistema deve ser tal que o estado estacionário, $P(\sigma, \infty) = \lim_{t \rightarrow \infty} P(\sigma, t)$, coincida com P_{eq} da equação 1.6. As taxas de transição $w_{\sigma \rightarrow \sigma'}$ do modelo são dadas em (3).

A distribuição de equilíbrio de um sistema termodinâmico deve obedecer à condição de balanceamento detalhado (ver demonstração na referência (1)), que neste caso pode ser escrita como:

$$P_{eq}(\sigma)w_{\sigma \rightarrow \sigma'} = P_{eq}(\sigma')w_{\sigma' \rightarrow \sigma}, \quad (1.8)$$

onde $w_{\sigma \rightarrow \sigma'}$ é a taxa de transição de um estado σ para um outro estado σ' . É simples verificar que esta condição é satisfeita no modelo de Glauber (veja (3)).

Assim como o modelo de Glauber, os processos estocásticos de muitas partículas são usualmente definidos em redes de d dimensões que representam o espaço físico. Uma coordenada de tempo t é introduzida e pode ser interpretada como uma dimensão a mais do sistema. Razão pela qual esses modelos estocásticos são ditos serem definidos em $d + 1$ dimensões.

Um dos mais simples modelos estocásticos de muitas partículas é o processo de exclusão parcialmente assimétrico em uma cadeia unidimensional com L sítios. Neste modelo as partículas se movem aleatoriamente à direita a uma taxa de transição p e à esquerda a uma taxa q . É chamado de processo de exclusão porque um princípio de exclusão é imposto: cada sítio da rede é ocupado no máximo por uma partícula. A configuração $s = \{s_1, s_2, s_3, \dots, s_L\}$ do sistema, é dada em termos de variáveis locais s_i , que indicam presença ($s_i = 1$) ou ausência ($s_i = 0$) de uma partícula no sítio i . A dinâmica do sistema consiste no seguinte. Com probabilidade pdt uma partícula no sítio i no tempo t , salta ao sítio $i + 1$ se este estiver vazio, e com probabilidade qdt a partícula vai para o sítio $i - 1$ se este estiver vazio. O caso totalmente assimétrico é aquele no qual alguma das taxas é zero. O correspondente operador de liouville H deste sistema pode ser escrito como (ver referência (4))

$$H = \sum_{i=1}^L H_{i,i+1} \quad (1.9)$$

onde $H_{i,i+1}$ é dado por

$$H_{i,i+1} = \mathbf{1}_1 \otimes \mathbf{1}_2 \otimes \dots \otimes \mathbf{1}_{i-1} \otimes \mathcal{L}_{i,i+1} \otimes \mathbf{1}_{i+2} \dots \otimes \mathbf{1}_L, \quad (1.10)$$

onde $\otimes$ representa o produto tensorial, $\mathbf{1}_i$ é uma matriz identidade de tamanho 2×2 e $\mathcal{L}_{i,i+1}$ é uma matriz 4×4 dada por:

$$\mathcal{L}_{i,i+1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p & -q & 0 \\ 0 & -p & q & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.11)$$

Generalizações deste modelo estocástico recebem o nome geral de modelos estocásticos de reação-difusão. Esses modelos, que tem sua origem em reações químicas, descrevem sistemas compostos de partículas de vários tipos (representadas por A, B, C...) que além de se difundir podem reagir entre si. Em uma rede, devido à exclusão de duas ou mais partículas no mesmo sítio, uma configuração pode ser expressada em termos de variáveis locais $s_i = 0, 1, 2, 3, \dots$, onde o 0 representa ausência de partículas, e o resto representa partículas do tipo A, B, C, ..., respectivamente. Muitos processos são possíveis:

As partículas também podem se difundir, com certas taxas, como acontece no processo de exclusão discutido anteriormente. Como exemplo, vamos considerar um modelo com apenas um tipo de partícula. O modelo pode ser considerado como um modelo de dois estados (two-state model), porque cada sítio pode estar ocupado por uma partícula ou estar vazio. Alguns processos são mostrados na figura 1. Em um modelo simples de

Figura 1 – O processo **a** corresponde a difusão, o processo **b** a coagulação e o processo **c** a aniquilação.

aniquilação, no qual as taxas de difusão e aniquilação são dadas por D e α respectivamente,

a matriz $\mathcal{L}_i$ pode ser escrita como:

$$\mathcal{L}_{i,i+1} = \begin{pmatrix} & | \circ \circ \rangle & | \circ \bullet \rangle & | \bullet \circ \rangle & | \bullet \bullet \rangle \\ \hline | \circ \circ \rangle & 0 & 0 & 0 & -\alpha \\ | \circ \bullet \rangle & 0 & D & -D & 0 \\ | \bullet \circ \rangle & 0 & -D & D & 0 \\ | \bullet \bullet \rangle & 0 & 0 & 0 & \alpha \end{pmatrix}. \quad (1.13)$$

Nas últimas décadas o estudo dos processos de não equilíbrio exatamente solúveis tem tido um grande desenvolvimento graças a uma observação: o operador de evolução H de certos modelos, como o de reação-difusão, está relacionado a sistemas quânticos de spins bem conhecidos. Por exemplo, na referência (5) os autores conseguiram “mapear” exatamente o processo de exclusão simétrico à equação de Schrödinger de um ferromagneto de Heisenberg. Esse tipo de mapeio foi estendido a outros processos de reação-difusão por Alcaraz *et al.* na referência (6), onde métodos de mecânica quântica de muitos corpos como o ansatz de Bethe, técnicas de férmions livres e outros métodos algébricos, foram usados para estudar os comportamentos dos modelos estocásticos.

No modelo de exclusão parcialmente assimétrico, por exemplo, o operador $H_{i,i+1}$ da equação 1.10 pode ser expressado em termos das matrizes de pauli σ^x , σ^y e σ^z

$$H_{i,i+1} = - \left\{ p\sigma_i^- \sigma_{i+1}^+ + q\sigma_i^+ \sigma_{i+1}^- + \frac{1}{4}\sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - \frac{p-q}{4}(\sigma_i^z - \sigma_{i+1}^z) - \frac{1}{4} \right\}, \quad (1.14)$$

onde $\sigma^\pm = \frac{1}{2}(\sigma^x \pm i\sigma^y)$. Portanto, a matriz H pode ser escrita como:

$$H = - \left\{ \sum_{i=1}^L \left(p\sigma_i^- \sigma_{i+1}^+ + q\sigma_i^+ \sigma_{i+1}^- + \frac{1}{4}\sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \right) - L/4 \right\}, \quad (1.15)$$

ou seja, como uma cadeia quântica de spins numa rede periódica. Esta cadeia de spins não é hermitiana no caso $p \neq q$. O ansatz de Bethe pode ser usado para obter exatamente os autovalores de H e calcular algumas grandezas físicas relevantes do processo estocástico (7–10).

Assim como nos fenômenos de equilíbrio, os fenômenos de não equilíbrio apresentam transições de fase, pontos críticos, expoentes críticos e leis de potência no comportamento assintótico de algumas grandezas. No modelo de aniquilação por exemplo, a concentração média de partículas do tipo A , $c_A(t)$, se comporta para tempos longos como

$$c_A(t) \sim t^{-\alpha}, \quad (1.16)$$

onde $\alpha = 1/2$. É possível encontrar para outros modelos estocásticos comportamentos do tipo exponencial

$$c_A(t) \sim e^{-t/\tau} . \quad (1.17)$$

Usando a terminologia de mecânica estatística do equilíbrio e da teoria quântica de campos, os comportamentos do tipo da equação 1.16 são chamados de críticos ou “sem massa”, enquanto o comportamento da equação 1.17 é denotado como “massivo”.

Nesta dissertação estudaremos a extensão de um modelo estocástico conhecido na literatura (11–15) como modelo Rouse and Peierls (“cresce e descasca”). O modelo, que chamaremos desde agora como RPM, faz parte de um conjunto de modelos chamados de modelos de crescimento ou modelos de crescimento de interface. Esses modelos podem ser definidos em uma rede discreta ou mediante equações contínuas. Os modelos chamados de *solid-on-solid* ou SOS são usualmente definidos numa rede unidimensional de L sítios, cada um deles associado à uma variável inteira não negativa h_i . O conjunto $\{h_i\}$ determina o estado do sistema (perfil) que evolui de acordo com as regras estocásticas que definem o modelo. As alturas $\{h_i\}$ definem a interface entre duas fases do sistema. Em modelos RSOS (*restricted solid-on-solid*) a dinâmica satisfaz também à condição

$$|h_i - h_{i+1}| \leq 1 , \quad (1.18)$$

ou seja, sítios adjacentes podem diferir somente em uma unidade. As grandezas que caracterizam a evolução da interface são a altura média $\bar{h}(t, L)$ e a largura da distribuição das alturas $w(t, L)$:

$$\begin{aligned} \bar{h}(t, L) &\equiv \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L h_i(t) \\ w(t, L) &\equiv \sqrt{\frac{1}{L} \sum_{i=1}^L [h_i(t) - \bar{h}(t)]^2} . \end{aligned} \quad (1.19)$$

Em muitos casos as interfaces são crescentes e exibem leis de escala simples. Em um sistema finito, e começando com uma interface “plana”, a largura para tempos curtos tem um incremento algébrico do tipo $w \sim t^\beta$, onde β é conhecido como expoente de crescimento. No limite de tempos longos, a largura w se torna constante, com um valor $w_{sat} \sim L^\alpha$, onde α é o expoente de “rugosidade”. Este tipo de comportamento é descrito pela relação de escala de Family-Vicsek (ver referência (16))

$$w(L, t) \sim L^\alpha f\left(\frac{t}{L^z}\right) , \quad (1.20)$$

onde $f(x)$ é uma função universal de escala, e $z = \alpha/\beta$ é conhecido como o expoente crítico dinâmico.

Os expoentes críticos β e z são usados para caracterizar as diferentes “classes de universalidade” de modelos de crescimento. Cada uma dessas classes de universalidade é caracterizada pelas simetrias do sistema, como invariância translacional, invariância temporal, ou invariância sob reflexão.

O RPM é definido em uma rede unidimensional de tamanho $L + 1$, onde os perfís das configurações obedecem, além da condição RSOS 1.18, as condições $(h_0, h_1, \dots, h_L)$:

$$h_0 = h_L = 0, \quad h_i \geq 0. \quad (1.21)$$

Na figura 2 é mostrada uma possível configuração, no caso $L = 14$. Para um dado tamanho

Figura 2 – Exemplo de interface com 15 sítios ($L = 14$).

de rede L , o número de configurações RSOS que satisfaz 1.21 é dado pelo número de Catalan C_n (17):

$$C_n = \frac{1}{n+1} \binom{2n}{n} = \frac{(2n)!}{(n+1)(n!)^2} = 1, 2, 5, 14, 42, \dots \quad (1.22)$$

onde $L = 2n$.

A dinâmica da interface (que será explicada detalhadamente na secção 2.4) pode ser facilmente visualizada imaginando-se que blocos inclinados caiam sobre a superfície. Com uma probabilidade $P_i = 1/(L-1)$ um bloco atinge o sítio i . O bloco pode ser refletido, absorvido ou desorvido. Na figura 3 são mostrados processos de absorção e desorção numa rede de tamanho $L = 14$ sítios.

As interfaces apresentam sítios com possibilidade de absorção, sítios com possibilidade de desorção e “picos”. Os blocos são refletidos sempre que atingem “picos”. Mas também podem ser refletidos em sítios de absorção ou desorção. O RPM depende de um único parâmetro $u = u_a/u_d$, onde u_a é a probabilidade do bloco ser absorvido e u_d é a probabilidade de ser desorvido. Observemos que o processo de desorção não é local, ao contrário do processo de absorção, onde o mesmo é local.

Figura 3 – Processos de absorção (acima) e adsorção (abaixo), numa rede de tamanho $L = 14$.

O comportamento do RPM é dado pela equação mestra:

$$\frac{d}{dt}P_a(t) = - \sum_b H_{ab}P_b(t) , \quad (1.23)$$

onde $P_a(t)$ é a probabilidade (não normalizada) de encontrar o sistema no estado $|a\rangle$, no tempo t , com taxas de transição dadas por $-H_{ab}$ ($a \neq b$). Conforme já vimos, H deve ser uma matriz intensidade. Assim, a mesma deve ter pelo menos um autovalor igual a zero. O autovetor à direita, $|0\rangle$, associado com esse autovalor, dá a distribuição de probabilidade no estado estacionário:

$$H|0\rangle = 0 \quad , \quad |0\rangle = \sum_a P_a|a\rangle , \quad (1.24)$$

onde $P_a = \lim_{t \rightarrow \infty} P_a(t)$. O RPM não possui balanceamento detalhado, razão pela qual se espera que o modelo descreva situações de não equilíbrio.

O RPM não surgiu de uma tentativa de explicar algum fenômeno fora do equilíbrio como no caso da dinâmica de Glauber ou dos processos de reação-difusão. Ele originou-se em uma investigação de algumas conexões entre as funções de onda do estado fundamental de uma cadeia antiferromagnética XXZ de Heisenberg e o modelo de “loop” $O(n)$ com $n = 1$ (ver referência (18)). Na referência (11) é mostrado como a estrutura de semigrupo da álgebra Temperley-Lieb (19), leva à interpretação do modelo de loop como um processo estocástico.

O RPM apresenta propriedades interessantes quando o valor do parâmetro é $u =$

1. A função de distribuição de probabilidade no estado estacionário do RPM, $|0\rangle$, está relacionada com um modelo de equilíbrio em duas dimensões, e algumas conjecturas acerca de grandezas físicas podem ser feitas. Além disso, o hamiltoniano na equação mestra 1.23 pode ser escrito como:

$$H = \sum_{i=1}^{L-1} (1 - e_i) , \quad (1.25)$$

onde os operadores e_i admitem representação em termos das matrizes de pauli

$$e_i = \frac{1}{2} \left[\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y - \frac{1}{2} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z + \frac{1}{2} + i \frac{\sqrt{3}}{2} (\sigma_i^z - \sigma_{i+1}^z) \right] . \quad (1.26)$$

Nesta representação, H na equação 1.25 se torna, a menos de termos de bordas, o hamiltoniano de uma cadeia quântica de spins integrável e invariante conforme. Esta cadeia é conhecida como a cadeia XXZ com valor de anisotropia $\Delta = -1/2$. Seu espectro pode ser calculado exatamente por meio do ansatz de Bethe, possuindo o comportamento para $L \rightarrow \infty$:

$$LE_0 = 0 , \quad LE_1 = 3\pi\sqrt{3} , \quad LE_2 = \frac{9\pi\sqrt{3}}{2} \dots , \quad (1.27)$$

o que leva (como veremos na secção 2.5.1) a uma determinação exata do expoente crítico dinâmico $z = 1$. O espectro da equação 1.27 é dado por uma teoria de campo conforme com $c = 0$, onde c é a carga central da álgebra de Virasoro (ver referência (20)).

A invariância de escala é uma característica das transições de fase em mecânica estatística. No ponto crítico, as correlações apresentam leis de potência “livres de escala”. Para descrever esses fenômenos são usadas teorias quânticas de campos invariantes de escala. Uma teoria de campo conforme é uma teoria que é invariante sob *transformações conformes*, transformações estas que incluem as rotações, traslações, dilatações (invariância de escala) e transformações conformes especiais. Ou seja, invariância conforme implica invariância de escala.

O fato do RPM ser descrito por uma teoria de campo conforme faz com que tanto a invariância de escala como a invariância conforme possam fazer previsões relacionadas a grandezas físicas do modelo, como por exemplo prever o valor do expoente crítico dinâmico z . O RPM é o primeiro exemplo de modelo estocástico que possui invariância conforme.

Na referência (14) os autores estudaram o RPM para valores do parâmetro $u \neq 1$, usando simulações de Monte Carlo, o que permitiu-lhes construir um diagrama de fase do modelo. O modelo mostra um único ponto crítico $u = 1$. Para $u < 1$ o modelo apresenta uma fase massiva, ou seja, as grandezas que caracterizam o modelo mostram leis expo-

nenciais do tipo da equação 1.17. Para $u > 1$ o sistema é invariante por transformações de escala (dilatações), mas não possui a invariância conforme. O expoente crítico dinâmico z varia continuamente com o parâmetro u .

Outro aspecto interessante do RPM é a presença de avalanches no processo de desorção, fazendo com que o modelo exiba criticalidade auto-organizada (SOC) (ver referência (21)). Em uma desorção a interface sofre uma perda de blocos, o número destes que deixam a interface representam o tamanho da avalanche.

As avalanches são estudadas no estado estacionário, perturbando o sistema através da queda de um bloco. Se definirmos $S(v, L)$ como a probabilidade de se obter avalanches de tamanho v em uma rede de tamanho L , o modelo exibe uma lei de escala simples, com o comportamento dado pela relação de escala Family-Vicsek (veja 1.20):

$$S(v, L) = v^{-\tau} F(v/L^D) , \quad (1.28)$$

onde τ e D são os expoentes críticos. Simulações de Monte Carlo mostram este tipo de lei no intervalo $1 \leq u \leq \infty$. O expoente D toma o valor 1 em todo o intervalo, mas o expoente τ toma valores que vão desde 3 para $u = 1$, até 2 para $u \rightarrow \infty$.

A extensão ao RPM, proposta nesta dissertação, introduz um novo parâmetro p que controla a força de atração (ou repulsão) que os “picos” da configuração tem sobre os blocos. A extensão é inspirada na álgebra Temperley-Lieb e o objetivo principal é estudar a possibilidade do modelo exibir características preditas tanto por invariância de escala como invariância conforme.

2 *O modelo Rouse and Peel*

Descreveremos neste capítulo algumas facetas do RPM. Começaremos mostrando a relação entre os processos estocásticos e a Mecânica Quântica.

Mostraremos também, como, a partir de certas álgebras associativas é possível definir processos estocásticos. Daremos um exemplo simples de uma álgebra abeliana relacionada com um modelo de “Pilha de Areia”. A álgebra Temperley-Lieb é um exemplo de álgebra que produz um processo estocástico. Esta álgebra tem relação direta com o RPM que será definido através das regras estocásticas. Daremos um exemplo simples para uma rede de tamanho $L = 6$.

O espectro do hamiltoniano do RPM no ponto $u = 1$ é dado por meio do mapeamento do modelo com uma cadeia quântica de spins XXZ. Mostraremos o espectro e as suas implicações.

O estado estacionário do RPM está relacionado com o estado à temperatura $T = 0$ de um modelo de mecânica estatística do equilíbrio em duas dimensões e também com o problema da contagem do número de matrizes de sinal alternante (AMS). Mostraremos algumas implicações dessas relações.

Definiremos as grandezas físicas relevantes que descrevem o modelo no espaço e no tempo, para analisarmos o modelo desde o ponto de vista de Criticalidade Auto-Organizada (SOC).

Finalizaremos com o diagrama de fase do modelo, que apresenta muitos aspectos importantes tanto do ponto de vista de modelos de interface crescente, como da teoria de fenômenos críticos em mecânica estatística: invariância de escala e invariância conforme.

2.1 Processos Estocásticos Markovianos e a equação Mestra

Iniciamos esta seção tecendo comentários adicionais aos feitos na introdução desta dissertação, sobre as soluções das equações mestras. Conforme vimos, a equação mestra pode ser colocada na forma simplificada dada por 1.23, i. e, como:

$$\frac{d}{dt}P_a(t) = - \sum_b H_{ab}P_b(t) . \quad (2.1)$$

A propriedade 1.5 implica que o vetor $\psi = (1, 1, 1, \dots, 1)$ é um autovetor à esquerda de H com autovalor zero. Como os autovalores são comuns aos dois lados de H , deve existir pelo menos um vetor ϕ tal que:

$$H\phi = 0 . \quad (2.2)$$

Cada ϕ é uma solução independente do tempo da equação mestra. É possível mostrar que as componentes de ϕ podem ser colocadas de forma a serem todas não negativas, e que portanto representa a distribuição de probabilidade estacionária do sistema (ver referência (1)). Além disso, no limite $t \rightarrow \infty$ todas as soluções, independente da situação inicial, tendem à solução estacionária. O que quer dizer que todos os autovalores de H possuem parte real negativa.

Equações mestras tem sido usadas para analisar problemas de cinética química e sistemas físicos fora do equilíbrio. É comum encontrar grandezas que tem um comportamento como o mostrado nas equações (1.16) e (1.17).

Um fato importante e bem conhecido é que alguns processos estocásticos podem ser mapeados em problemas de cadeias quânticas de spin. A equação mestra pode ser expressada em um formalismo de mecânica quântica, por meio de uma equação de Schrödinger de tempo imaginário. Assim, os problemas de dinâmica estocástica podem ser estudados com técnicas desenvolvidas em mecânica quântica e mecânica estatística. Um exemplo paradigmático que mencionamos na introdução é o processo de exclusão simétrica. O Hamiltoniano correspondente neste caso é do modelo de Heisenberg isotrópico de spin 1/2 (ver referência (5)).

A equação 2.1 é bastante similar à equação de Schrödinger de um sistema quântico com evolução em tempo imaginário (Euclidiano). Apesar desta similaridade, convém

notar que as grandezas físicas do processo estocástico são calculadas de forma distinta que no formalismo quântico. Seja X um observável do sistema descrito pela dinâmica estocástica. O valor esperado, em função do tempo, pode ser calculado como:

$$\langle X \rangle(t) = \langle 0 | X e^{-Ht} | \psi(0) \rangle , \quad (2.3)$$

onde $\langle 0 | = (1, 1, 1, \dots, 1)$. O estado inicial $|\psi(0)\rangle$ pode ser escrito como uma combinação linear de autovetores do hamiltoniano:

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle . \quad (2.4)$$

Introduzindo este resultado na equação (2.3), obtemos:

$$\langle X \rangle(t) = \sum_n c_n e^{-E_n t} \langle 0 | X | \psi_n \rangle , \quad (2.5)$$

onde E_n é o autovalor associado ao autovetor $|\psi_n\rangle$. A partir desta equação é fácil ver que o comportamento de $\langle X \rangle(t)$ para tempos longos é governado pelos autovalores de H que têm a menor parte real.

Podemos então, obter o expoente z de uma análise de tamanho finito do hamiltoniano do sistema. Comparando a relação de escala 1.20 com a equação 2.5, vemos que

$$Re(E_1) \sim \frac{1}{L^z} , \quad (2.6)$$

onde E_1 é o autovalor com a menor parte real (não nula) do hamiltoniano H . O espectro do sistema pode ser obtido usando técnicas já bem conhecidas para cadeias quânticas, como diagonalização numérica ou mesmo a aplicação do ansatz de Bethe, quando possível.

2.2 Álgebras associativas e processos estocásticos

Álgebras surgem em vários problemas relacionados com a mecânica estatística, e no caso do modelo Rouse and Peierls jogam um papel importante. Nesta secção faremos algumas definições importantes e mostraremos que a partir de certas álgebras associativas podemos

definir processos estocásticos.

Uma álgebra associativa consiste de um espaço vetorial A junto com uma operação binária ou produto de vetores, $A \times A \rightarrow A$, tal que:

$$(a + b)c = ac + bc \quad , \quad c(a + b) = ca + cb ; \quad (2.7)$$

onde $\{a, b, c\} \in A$.

Para nossos propósitos a álgebra A é especificada por um subconjunto de vetores chamados geradores, junto com relações entre produtos deles. Todos os elementos da álgebra A são combinações lineares de produtos de geradores. Um produto arbitrário de geradores é chamado “palavra”.

Mostraremos agora sob que condições podemos produzir uma matriz intensidade a partir da base dos geradores de uma álgebra associativa. Sejam $\{e_i\}$ os geradores da álgebra A . Definiremos o operador H como:

$$H = \sum_{\alpha} c_{\alpha} (1 - W_{\alpha}) , \quad (2.8)$$

onde as W_{α} são palavras (ou seja, que podem ser escritas como: $W_{\alpha} = e_i e_j \dots e_q$), os c_{α} são números reais com a condição $c_{\alpha} \geq 0$. O conjunto V_{α} ($\alpha = 1, 2, \dots, N_p$) de palavras independentes forma uma base para um espaço vetorial onde H atua. Nesta base, H é representado pelos seus elementos $H_{ab} = \langle V_a | H | V_b \rangle$. Para que esta seja uma matriz intensidade, a mesma deve satisfazer as seguintes propriedades 1.4 e 1.5 que por comodidade as repetimos:

(a) $\sum_a H_{ab} = 0$, e

(b) $H_{ab} \leq 0$ para $a \neq b$.

O produto de qualquer par de palavras pertence também ao espaço vetorial. Assim, este pode ser escrito como combinação linear de vetores da base, ou seja

$$|W_k\rangle |V_b\rangle = \sum_i P_i^{(k,b)} |V_i\rangle . \quad (2.9)$$

A propriedade (a) implica que

$$\begin{aligned}
0 &= \sum_a H_{ab} = \sum_a \langle V_a | H | V_b \rangle \\
&= \sum_a \langle V_a | \sum_k c_k (1 - |W_k\rangle) | V_b \rangle \\
&= \sum_a \sum_k c_k \delta_{ab} - \sum_a \sum_k c_k \langle V_a | \left(\sum_i P_i^{(k,b)} | V_i \rangle \right) \\
&= \sum_k c_k - \sum_a \sum_k \sum_i c_k P_i^{(k,b)} \delta_{ai} \\
&= \sum_k c_k - \sum_k c_k \sum_i P_i^{(k,b)} .
\end{aligned} \tag{2.10}$$

Isto implica que a álgebra deve satisfazer

$$\sum_i P_i^{(k,b)} = 1, \tag{2.11}$$

para toda palavra W_k , e para qualquer palavra V_b . A propriedade (b) nos dá:

$$\langle V_a | H | V_b \rangle = - \sum_k c_k P_a^{(k,b)} \leq 0, \tag{2.12}$$

o que é certo se tivermos $P_a^{(k,b)}$ real não negativo, ou seja,

$$P_a^{(k,b)} \geq 0. \tag{2.13}$$

Assim, se tivermos uma álgebra associativa geral que satisfaz 2.9 com $P_a^{(k,b)} > 0$ para quaisquer valores de c_α (reais), o operador 2.8 é o da evolução de um processo estocástico.

Como exemplo, apresentaremos um modelo de pilha de areia (ver referência (21)), que se relaciona a uma álgebra associativa abeliana (devido a isto, este modelo é também chamado de modelo de pilha de areia abeliano). Isto é, a álgebra gera uma matriz intensidade que corresponde ao operador de evolução de uma equação mestra. Consideremos uma rede unidimensional de L sítios. Cada um desses sítios pode estar vazio ou ter, no máximo, uma “partícula”. O número total de estados é dado por 2^L . Na figura 4 são mostrados os oito estados correspondentes a uma rede de tamanho $L = 3$.

A dinâmica do sistema é dada pelas seguintes regras. Com uma probabilidade $P_i = 1/L$, uma partícula é jogada no sítio i ($i = 1, 2, \dots, L$). Se o sítio estiver vazio, o sistema absorve a partícula com probabilidade 1. Se o sítio estiver ocupado por uma partícula, podem acontecer duas coisas: com probabilidade “a” as duas partículas passam a ocupar o sítio $i + 1$, e com probabilidade “b” só uma das partículas passa a ocupar o sítio $i + 1$,

Figura 4 – Estados possíveis para uma rede de tamanho $L = 3$ no modelo de pilha de areia. Círculos brancos indicam ausência de partículas, enquanto que círculos pretos indicam presença de partículas.

Figura 5 – Exemplo da dinâmica de um modelo de pilha de Areia com $L = 3$ sítios.

sendo $a+b = 1$. Se o último sítio ($i = L$) estivesse envolvido, os movimentos das partículas implicarão no desaparecimento das mesmas.

Após a queda de uma partícula, o sistema deverá ficar num dos estados “estáveis”, ou seja, estados com, no máximo, uma partícula por sítio. Um exemplo é mostrado na figura 5. No exemplo da figura, uma partícula atinge o sítio $i = 1$. Depois, duas partículas passam ao sítio $i = 2$. Seguidamente, duas partículas passam ao último sítio, o sítio $i = 3$, e finalmente uma partícula fica fora do sistema, obtendo-se uma configuração estável.

O modelo é caracterizado por uma álgebra abeliana. Sejam A_i ($i = 1, 2, \dots, L$) os geradores da álgebra. O hamiltoniano do sistema é definido como:

$$H = \sum_{i=1}^L \frac{1}{L} (1 - A_i) , \quad (2.14)$$

que atua sobre o espaço vetorial das palavras independentes formadas pelos monômios: 1 , A_i , $A_i A_j (i \neq j)$, $A_i A_j A_k (i \neq j \neq k)$, $\dots$. As palavras representam os estados do sistema. No estado $A_i A_j \dots A_k$ o sítio p está ocupado se o termo A_p aparece no monômio.

O operador H da equação (2.14) representa a queda de partículas, através dos geradores A_i , que atuam sobre os estados, ou seja, as palavras.

Para obter a dinâmica correta, os geradores devem satisfazer às seguintes relações:

$$A_i^2 = a A_{i+1}^2 + b A_i A_{i+1}, \quad i = 1, 2, \dots, L-1 , \quad (2.15)$$

$$A_L^2 = a + b A_L , \quad (2.16)$$

e

$$[A_i, A_j] = 0, \quad (2.17)$$

com $a + b = 1$, e $a, b \geq 0$. A relação (2.15) mostra o que acontece quando uma partícula atinge um sítio ocupado, a relação (2.16) diz o que acontece no último sítio, onde pode haver perda das partículas. A ordem em que são aplicados os operadores não tem relevância, fato que está contido na relação (2.17).

Como exemplo, consideremos uma rede de tamanho $L = 2$. O espaço vetorial tem dimensão $2^2 = 4$. As palavras independentes neste caso seriam: 1 , A_1 , A_2 , e $A_1 A_2$. Considerando as relações entre os geradores, a matriz gerada pelo hamiltoniano (2.14) é dada por:

$$H = - \begin{pmatrix} -1 & \frac{a^2}{2} & \frac{a}{2} & \frac{a^2(1-a)}{2} \\ \frac{1}{2} & -1 & 0 & \frac{a(2-a)}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{a(1-a)}{2} & \frac{-(a+1)}{2} & \frac{a(1-a+a^2)}{2} \\ 0 & \frac{2-a}{2} & \frac{1}{2} & \frac{-a(3-a)}{2} \end{pmatrix}, \quad (2.18)$$

que é, de fato, uma matriz intensidade.

2.3 Processo estocástico associado à álgebra de Temperley e Lieb

A álgebra Temperley-Lieb (19) é definida pelos geradores $e_1, e_2, \dots, e_L$, que satisfazem às relações:

$$e_i^2 = (q + q^{-1})e_i \quad e_i e_{i \pm 1} e_i = e_i \quad [e_i, e_j] = 0 \quad \text{para } |i - j| \geq 2, \quad (2.19)$$

com $1 \leq i \leq L - 1$. Vemos de 2.19 que a palavra e_i^2 é expressa em função da palavra e_i , mas não satisfaz em geral a propriedade 2.11. Assim, para ter um processo estocástico associado à álgebra de Temperley-Lieb temos que nos restringir ao caso $q = e^{i\pi/3}$, tal que $(q + q^{-1}) = 1$.

É simples verificar neste caso que se tomamos qualquer conjunto de palavras W_α , as condições 2.11 e 2.19 serão satisfeitas e temos um processo estocástico.

A combinação especial em que tomamos em 2.8 como palavras independente os gera-

em 2.21, e usando as regras da álgebra de Temperley-Lieb 2.19. Com $L = 6$, os geradores seriam $\{e_1, e_2, e_3, e_4, e_5\}$, e teríamos que: $I_0 = \prod_{i=1}^{L/2} e_{2i-1} = e_1 e_3 e_5$.

Para achar as palavras no ideal aplicamos as palavras W_α à esquerda de I_0 , e usamos as regras da álgebra. Alguns exemplos do processo:

$$\begin{aligned} W_\alpha = e_3 e_2, W_\alpha I_0 &= e_3 e_2 e_1 e_3 e_5 = e_3 e_2 e_3 e_1 e_5 = e_3 e_1 e_5 = I_0 \\ W_\alpha = e_2 e_3, W_\alpha I_0 &= e_2 e_3 e_1 e_3 e_5 = e_2 e_1 e_3^2 e_5 = e_2 e_1 e_3 e_5 = e_2 I_0 \\ W_\alpha = e_1 e_4, W_\alpha I_0 &= e_1 e_4 e_1 e_3 e_5 = e_4 e_1^2 e_3 e_5 = e_4 e_1 e_3 e_5 = e_4 I_0. \end{aligned} \quad (2.25)$$

No final do processo, vamos obter 5 palavras no ideal: (1) I_0 , (2) $e_2 I_0$, (3) $e_4 I_0$, (4) $e_2 e_4 I_0$, (5) $e_3 e_2 e_4 I_0$. Os diagramas correspondentes são:

$$\begin{aligned} |1\rangle : & \text{.....} & |2\rangle : & \text{.....} & |3\rangle : & \text{.....} \\ & \text{.....} & & \text{.....} & & \text{.....} \\ & \text{.....} & & \text{.....} & & \text{.....} \\ |4\rangle : & \text{.....} & |5\rangle : & \text{.....} & & \end{aligned} \quad (2.26)$$

Os elementos da matriz H_{ab} , na base 2.26, são obtidos a través do hamiltoniano 2.20. Por exemplo, aplicando H a $|5\rangle$:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^5 (1 - e_i) |5\rangle &= [5 - (e_1 + e_2 + e_3 + e_4 + e_5)] \text{.....} \\ &= 5 \times \text{.....} - (\text{.....} + \text{.....} \\ &\quad + \text{.....} + \text{.....} + \text{.....}) \\ &= 4 \times \text{.....} - 2 \times \text{.....} - 2 \times \text{.....} \end{aligned} \quad (2.27)$$

é possível obter os valores de uma das colunas da matriz, neste caso a coluna do vetor $|5\rangle$. De 2.27 se deduz que $H|5\rangle = 4|5\rangle - 2|1\rangle - 2|4\rangle$, e daí que: $H_{15} = -2$, $H_{25} = 0$, $H_{35} = 0$, $H_{45} = -2$, $H_{55} = -4$. Fazendo os cálculos restantes se obtém a matriz completa:

$$H_{ab} = - \begin{pmatrix} -2 & 2 & 2 & 0 & 2 \\ 1 & -3 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -3 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & -3 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -4 \end{pmatrix}, \quad (2.28)$$

que é, de fato, uma matriz intensidade.

2.4 A álgebra Temperley-Lieb e o modelo Raise and Peel

Na seção anterior obtivemos processos estocásticos onde as configurações podem ser associadas a ligações entre sítios que não se cruzam. Para simplificar a visualização de tais processos estocásticos iremos fazer uma associação unívoca entre as configurações de ligações e perfis de superfície em duas dimensões.

Consideremos uma rede unidimensional com $L + 1$ sítios ($L = 2n$, com $n = 1, 2, 3, \dots$). Cada sítio i tem associada uma altura h_i . O conjunto de alturas $\{h_i\}$ obedecendo as regras RSOS (restricted solid-on-solid):

$$h_{i+1} - h_i = \pm 1, \quad h_0 = h_L = 0, \quad h_i \geq 0. \quad (2.29)$$

Na figura 7 é mostrada uma possível configuração, no caso $L = 16$, que gera uma interface. O fato interessante aqui, é que existe uma correspondência entre cada interface

Figura 7 – Exemplo de interface com 17 sítios ($L = 16$).

gerada pelas “trajetórias RSOS” e os diagramas de loops contidos no ideal T (dado em 2.21), com aqueles mostrados na figura 6. Como exemplo, vamos pegar a interface da figura 7. Desenhemos linhas de contorno como na figura 8(a). Depois disso, fazemos um

Figura 8 – Exemplo de correspondência entre as interfaces RSOS e os diagramas de loops.

endireitamento da interface, mantendo as linhas de contorno, e rodamos em torno do eixo horizontal; obtendo assim o diagrama de loops mostrado na figura 8(b).

A correspondência entre os diagramas de loops e as interfaces criadas pelas trajetórias RSOS permite visualizar a dinâmica gerada pelo hamiltoniano 2.20 atuando sobre o ideal à esquerda 2.21. O número de palavras no ideal 2.21 é dado pelo número de Catalan C_n ((17)):

$$C_n = \frac{1}{n+1} \binom{2n}{n} = \frac{(2n)!}{(n+1)(n!)^2} = 1, 2, 5, 14, 42, \dots \quad (2.30)$$

onde $L = 2n$. O caso $n = 3$ ($L = 6$), foi ilustrado na seção 2.3, página (35), e os perfis RSOS correspondentes são dados na figura 9. Uma vez definido o espaço de configurações

Figura 9 – Trajetórias RSOS no caso de uma rede de tamanho $L = 6$

temos que procurar as regras estocásticas que ligam os estados pela ação do hamiltoniano. Podemos visualizar tais regras a partir de blocos que caem nos sítios da superfície RSOS. Tais blocos fazem o papel dos geradores e_i no hamiltoniano. O fato de termos os coeficientes c_α em 2.8 iguais em 2.20, indica que os blocos caem com igual probabilidade em qualquer sítio da rede.

Note-se que a figura 7, pode ser vista como a soma de um “substrato”:

$$\text{Diagram of a row of 8 small triangles} , \quad (2.31)$$

e um conjunto de blocos:

$$\text{Diagram of two block shapes: a 2x2 diamond and a 1x3 horizontal chain of diamonds} . \quad (2.32)$$

A queda de um bloco pode ter vários efeitos: 1) chamado de desorção, no qual ocorre

a perda de alguns blocos:

2) chamado de absorção, onde o bloco é absorvido:

e 3) no qual o bloco é refletido e a interface fica igual:

Nos exemplos anteriores foi usada uma rede de $L = 14$ sítios. Devido ao efeito de crescimento local e desorção não local (descasca), o modelo acima recebe o nome de cresce-descasca ou modelo Raise and Peel. Na realidade, como as taxas de absorção e de desorção são iguais, corresponde a um ponto do modelo mais geral com taxas distintas.

Vamos fazer agora uma definição precisa do modelo Raise and Peel, em termos da evolução em tempo discreto da interface gerada pelas configurações RSOS. A dinâmica Markoviana é definida pela queda dos blocos. Em cada instante, e com probabilidade $P_i = 1/(L-1)$, um bloco é dirigido ao sítio i , ($i = 1, 2, 3, \dots, L-1$). Dependendo do valor da pendente $s_i = (h_{i+1} - h_{i-1})/2$, no sítio i , os seguintes processos podem ocorrer:

1. $s_i = 0$ e $h_i > h_{i-1}$, o bloco atinge um “pico” e é refletido, ver 2.35

2. $s_i = 0$ e $h_i < h_{i-1}$, o bloco atinge um mínimo local (ver 2.34). Com probabilidade u_a , o bloco é absorvido, e com probabilidade $(1 - u_a)$ o bloco é refletido.
3. $s_i = -1$, com probabilidade u_d o bloco é refletido desencadeando uma desorção de uma camada de blocos da região compreendida entre os sítios i e b , onde $h_i = h_b$, ou seja, $h_j \mapsto h_j - 2$, para $j = i + 1, \dots, i + b - 1$, ver 2.33. Essa camada contém $b - 1$ blocos. Com probabilidade $1 - u_d$, o bloco é refletido sem causar desorção.
4. $s_i = 1$, com probabilidade u_d o bloco é refletido desencadeando uma desorção de uma camada de blocos da região compreendida entre os sítios i e $i - b$, onde $h_i = h_b$, ou seja, $h_j \mapsto h_j - 2$, para $j = i - b + 1, \dots, i - 1$. Essa camada contém $b - 1$ blocos. Com probabilidade $1 - u_d$, o bloco é refletido sem causar desorção.

Vamos dar agora um exemplo de construção da matriz intensidade do Modelo Raise and Peel. A forma da matriz é dada pela equação:

$$H_{ab} = \delta_{ab} \sum_{c=1}^M w_{ac} - w_{ab} , \quad (2.36)$$

onde M é o número de estados do sistema e w_{ab} é a taxa de transição do estado $|b\rangle$ ao estado $|a\rangle$. Vamos tomar o caso ($L = 6$) da figura 9.

Figura 10 – Figura que mostra duas formas de desorção. Neste caso, o estado $|2\rangle$ “vai” para o estado $|1\rangle$ de duas formas diferentes.

Usando as regras da página (38) (ver exemplo na figura 10), se obtém:

$$H_{ab} = \begin{pmatrix} 2u_a & -2u_d & -2u_d & 0 & -2u_d \\ -u_a & 2u_d + u_a & 0 & -u_d & 0 \\ -u_a & 0 & 2u_d + u_a & -u_d & 0 \\ 0 & -u_a & -u_a & 2u_d + u_a & -2u_d \\ 0 & 0 & 0 & -u_a & 4u_d \end{pmatrix} . \quad (2.37)$$

Fatorizando u_d e introduzindo a variável $u = u_a/u_d$, a matriz fica:

$$H_{ab} = -u_d \begin{pmatrix} -2u & 2 & 2 & 0 & 2 \\ u & -(2+u) & 0 & 1 & 0 \\ u & 0 & -(2+u) & 1 & 0 \\ 0 & u & u & -(2+u) & 2 \\ 0 & 0 & 0 & u & -4 \end{pmatrix}. \quad (2.38)$$

No caso $u = 1$ (ou seja $u_a = u_d$) esta matriz, a menos do fator de proporcionalidade u_d fica igual à matriz 2.28. Portanto, os modelos são equivalentes. Observe-se que as taxas de absorção e desorção podem ser escritas como: No caso geral u é o único parâmetro do modelo Raise and Peel.

2.5 Descrição do modelo

Nesta secção veremos como o estado estacionário do RPM está relacionado com a mecânica estatística do equilíbrio. Tal relação será feita observando-se a sua conexão com o modelo de seis vértices bidimensional, que por sua vez, apresenta também relação com o problema combinatório de enumeração das matrizes de sinal alternante (ASM).

Revisamos a seguir, o espectro da matriz intensidade do modelo, que é dada por uma cadeia quântica de spins. Seguimos com a definição das grandezas físicas que caracterizam o sistema no espaço e no tempo, além de falar um pouco das avalanches no modelo e a presença de criticalidade auto-organizada (SOC) . Finalizamos a secção com o diagrama de fases do modelo.

2.5.1 Cadeia quântica de spins e o RPM

Um aspecto muito importante do RPM é a sua exata integrabilidade. O espectro do hamiltoniano, no caso $u = 1$, pode ser calculado exatamente. A álgebra 2.19 admite uma

representação em termos de spins:

$$e_i = \frac{1}{2} \left[\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y - \frac{1}{2} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z + \frac{1}{2} + i \frac{\sqrt{3}}{2} (\sigma_i^z - \sigma_{i+1}^z) \right] , \quad (2.39)$$

onde σ_i^x, σ_i^y e σ_i^z são as matrizes de Pauli. Se introduzirmos 2.39 no hamiltoniano:

$$H = \sum_{i=1}^{L-1} (1 - e_i) , \quad (2.40)$$

obtemos o hamiltoniano de uma cadeia quântica de spins $\frac{1}{2}$ atuando num espaço vetorial de dimensão 2^L . A cadeia quântica é um modelo integrável (veja (22)), e seu espectro pode ser obtido usando o ansatz de Bethe. O espectro de H atuando no ideal à esquerda 2.21 é obtido considerando-se o setor escalar da cadeia quântica. As primeiras excitações do espectro, para $L \rightarrow \infty$, são dadas por (veja o apêndice de (14)):

$$LE_0 = 0 , \quad LE_1 = 3\pi\sqrt{3} , \quad LE_2 = \frac{9\pi\sqrt{3}}{2} \dots \quad (2.41)$$

Este espectro é dado pelos caracteres de uma álgebra de Virasoro (veja (20)) com a carga central $c = 0$, o que implica que o sistema é invariante conforme. O conhecimento exato do espectro no sistema finito nos permite calcular o expoente crítico dinâmico z exatamente. De 2.41, temos que:

$$Re(E_1) = \frac{3\pi\sqrt{3}}{L} \sim \frac{1}{L} . \quad (2.42)$$

Da equação 2.6 vemos que o expoente crítico dinâmico $z = 1$.

2.5.2 A conexão do RPM com o modelo FPL e as matrizes de sinal alternante

O autovetor $|0\rangle$ associado ao autovalor zero do hamiltoniano 2.28 para o caso $L = 6$ é dado por:

$$|0\rangle = (11, 5, 5, 4, 1) . \quad (2.43)$$

Esse autovetor $|0\rangle$ corresponde à solução da equação $H|0\rangle = 0$, sendo portanto, o estado estacionário do modelo. Neste caso o fator de normalização $\langle 0|0\rangle$ é 26. O interessante

neste caso é que os coeficientes de $|0\rangle$ são inteiros positivos. Assim, é de se suspeitar que tais números estejam associados a um problema de mecânica estatística do equilíbrio à temperatura $T = 0$ (18). Vamos considerar o modelo de seis vértices estudado em (17), em uma rede de $(L - 1) \times L/2$ sítios, e com as seguintes condições na fronteira:

no caso $L = 6$. Os estados possíveis em cada ponto da rede são:

Imaginemos que todos os vértices tenham o mesmo pêso, isto é, o chamado modelo do gelo. É possível fazer uma transformação, partindo desta configuração, para uma configuração chamada de “Empacotamento completo” (*Fully Packed loop FPL*), onde cada sítio é visitado unicamente por uma trajetória. Para fazer a transformação, dividimos

Figura 11 – Transformação das setas dependendo se o sítio for par ou ímpar

a rede em duas sub-redes, uma delas contém os sítios pares e a outra os ímpares. Em seguida, estabelecemos a correspondência feita na figura 11, entre linhas cheias e pontilhadas com as direções das flechas nas subredes. O resultado de aplicar tal transformação em 2.44 é mostrado na figura 12. O número total de configurações FPL, neste caso ($L = 6$) é

Figura 12 – Diagrama equivalente a 2.44.

26. Estas configurações ainda podem ser agrupadas segundo os estados 2.26. Ao estado

$|1\rangle$ correspondem 11 diagramas, ao estado $|2\rangle$ 5, ao estado $|3\rangle$ 5, ao estado $|4\rangle$ 4 e ao estado $|5\rangle$ 1:

$$|1\rangle \mapsto \begin{array}{cccc} \begin{array}{c} \text{Diagram 1} \\ \text{Diagram 2} \end{array} & \begin{array}{c} \text{Diagram 3} \\ \text{Diagram 4} \end{array} & \begin{array}{c} \text{Diagram 5} \\ \text{Diagram 6} \end{array} & \begin{array}{c} \text{Diagram 7} \\ \text{Diagram 8} \end{array} \\ \begin{array}{c} \text{Diagram 9} \\ \text{Diagram 10} \end{array} & \begin{array}{c} \text{Diagram 11} \\ \text{Diagram 12} \end{array} & \begin{array}{c} \text{Diagram 13} \\ \text{Diagram 14} \end{array} & \begin{array}{c} \text{Diagram 15} \\ \text{Diagram 16} \end{array} \\ \begin{array}{c} \text{Diagram 17} \\ \text{Diagram 18} \end{array} & \begin{array}{c} \text{Diagram 19} \\ \text{Diagram 20} \end{array} & \begin{array}{c} \text{Diagram 21} \\ \text{Diagram 22} \end{array} & \end{array} \quad (2.46)$$

$$|2\rangle \mapsto \left\{ \begin{array}{cccc} \begin{array}{c} \text{Diagram 23} \\ \text{Diagram 24} \end{array} & \begin{array}{c} \text{Diagram 25} \\ \text{Diagram 26} \end{array} & \begin{array}{c} \text{Diagram 27} \\ \text{Diagram 28} \end{array} & \begin{array}{c} \text{Diagram 29} \\ \text{Diagram 30} \end{array} \\ \begin{array}{c} \text{Diagram 31} \\ \text{Diagram 32} \end{array} & & & \end{array} \right\} \quad (2.47)$$

$$|3\rangle \mapsto \left\{ \begin{array}{cccc} \begin{array}{c} \text{Diagram 33} \\ \text{Diagram 34} \end{array} & \begin{array}{c} \text{Diagram 35} \\ \text{Diagram 36} \end{array} & \begin{array}{c} \text{Diagram 37} \\ \text{Diagram 38} \end{array} & \begin{array}{c} \text{Diagram 39} \\ \text{Diagram 40} \end{array} \\ \begin{array}{c} \text{Diagram 41} \\ \text{Diagram 42} \end{array} & & & \end{array} \right\} \quad (2.48)$$

$$|4\rangle \mapsto \left\{ \begin{array}{cccc} \begin{array}{c} \text{Diagram 43} \\ \text{Diagram 44} \end{array} & \begin{array}{c} \text{Diagram 45} \\ \text{Diagram 46} \end{array} & \begin{array}{c} \text{Diagram 47} \\ \text{Diagram 48} \end{array} & \begin{array}{c} \text{Diagram 49} \\ \text{Diagram 50} \end{array} \end{array} \right\} \quad (2.49)$$

$$|5\rangle \mapsto \left\{ \begin{array}{c} \text{Diagram 51} \\ \text{Diagram 52} \end{array} \right\} \quad (2.50)$$

Repare que se percorrermos da esquerda para a direita a superfície do diagrama, desprezando-se curvas fechadas, obtemos os diagramas de ligações mostrados em 2.26.

Além da conexão mostrada anteriormente, existe uma correspondência entre o número de configurações de FPLs, com as condições de fronteira 2.44, e as matrizes de “sinal alternante” (ASM, “alternating sign matrices” (23)). Uma matriz desse tipo é uma matriz quadrada onde os elementos são 0, 1 ou -1 , com as seguintes duas condições : 1) a soma das entradas em cada linha e em cada coluna é igual a um, e 2) as entradas diferentes de zero em cada linha e cada coluna alternam em sinal. Temos aqui alguns exemplos:

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ e } \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.51)$$

Note-se que a última matriz é simétrica com respeito à segunda linha, ou seja, “horizontalmente simétrica”. O número total de matrizes de sinal alternantes, horizontalmente simétricas de $(L + 1) \times (L + 1)$ é conhecido (24), e dado por:

$$A_{2n+1} = \prod_{j=0}^{n-1} (3j - 2) \frac{(2j + 1)!(6j + 3)!}{(4j + 2)!(4j + 3)!} = 1, 3, 26, \dots, \quad (2.52)$$

onde $L = 2n$. A correspondência entre os vértices, do modelo de seis vértices, e as entradas

Figura 13 – Correspondência entre os vértices e as ASM.

das matrizes de sinal alternante é mostrada na figura 13. Como exemplo, tomemos $L = 6$, e um dos diagramas correspondente ao estado $|2\rangle$ de 2.47. A matriz ficaria de tamanho 7×7 e a configuração FPL teria 5×3 pontos:

$$\left(\begin{array}{ccccccc} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right) \quad (2.53)$$

Desta forma o valor da normalização $\langle 0|0\rangle$, do estado estacionário do RPM no caso $u = 1$, pode ser obtido da equação 2.52.

2.5.3 Comportamento das flutuações espaciais e temporais no RPM

As grandezas físicas mais interessantes que caracterizam os perfis de densidade do RPM são:

$$\begin{aligned} n(L) &= \frac{1}{L-1} \left\langle \sum_{i=1}^{L-1} (1 - |s_i|) \right\rangle, \\ K(L) &= \left\langle \sum_{j=1}^L \delta_{h_j, 0} \right\rangle, \\ h(L) &= \frac{1}{L} \left\langle \sum_{i=1}^L h_i \right\rangle, \\ h_{1/2}(L) &= \langle h_{L/2} \rangle, \end{aligned} \quad (2.54)$$

onde $n(L)$ é a fração de sítios que não apresentam desorção, $K(L)$ o número de aglomerados, $h(L)$ a altura média e $h_{1/2}(L)$ a altura no ponto médio da rede. As quantidades entre $\langle \rangle$ correspondem a valores médios num conjunto estatístico de interfaces no estado estacionário.

O estado estacionário do modelo RPM no caso $u = 1$, admite algumas conjecturas para as grandezas acima, que já foram testadas em alguns artigos (ver (13) e (15)).

Existe uma conjectura para $n(L)$ (13):

$$n(L) = \frac{3L^2 - 2L + 2}{(L-1)(4L+2)}, \quad (2.55)$$

que já foi testada para redes de até 18 sítios (13). No limite $L \rightarrow \infty$, $n(L) = 3/4$. Outra conjectura envolve $P_n(k)$, a probabilidade de ter k aglomerados numa rede de tamanho $L = 2n$ (25):

$$P_n(k) = \frac{4^{n+k}}{27^n} \frac{(1/2)_{n+k}}{(1/3)_{2n}} \frac{(3n+1)!(2n-k-1)!}{n!(n-k)!(2n+k+1)!}, \quad (2.56)$$

onde $(a)_k = \Gamma(a+k)/\Gamma(a)$. Da definição de $P_n(k)$ se segue que:

$$K(L) = \sum_{k=1}^n k P_n(k). \quad (2.57)$$

A partir daí, em (13) é obtida a expressão para $K(L)$:

$$K(L) = \frac{1}{3} \left(\prod_{j=0}^{n-1} \frac{(2j+1)(3j+4)}{(j+1)(6j+1)} - 1 \right), \quad (2.58)$$

que, no limite $L \rightarrow \infty$ tem a forma (veja referência (25)):

$$K(L) \approx \frac{\Gamma(1/3)\sqrt{3}}{2\pi} L^{2/3} \quad (L \rightarrow \infty) . \quad (2.59)$$

Em geral, pode-se definir um expoente crítico α para o número de aglomerados pela relação: $K(L) \sim L^\alpha$. No caso $u = 1$ tem-se então o valor $\alpha = 2/3$. A densidade de aglomerados, definida como:

$$\rho(L) = \frac{K(L)}{L} , \quad (2.60)$$

foi estudada mediante simulações de Monte Carlo, em (15). Para valores de u no intervalo $0 \leq u < 1$ a densidade de aglomerados no limite $L \rightarrow \infty$ (ρ_∞) apresenta valores finitos. Tais valores variam desde $\rho_\infty = 1/2$ para $u = 0$, até zero para $u = 1$. O valor para $u = u_a/u_d = 0$ é evidente a partir da física do modelo, sem absorção o único estado estacionário possível é o substrato, que tem $\rho(L) = 1/2$ para todo valor de L . O caso $u = 1$ é crítico como se vê na equação 2.59. Isto nos diz que para $0 < u < 1$ o RPM não é crítico (massivo). Assim, existe um valor crítico para o parâmetro u do sistema u , $u_c = 1$, estando o modelo numa fase massiva para $u < 1$.

A conexão do modelo com a cadeia de heisenberg anisotrópica crítica (veja seção 2.5.1), nos garante que o modelo RPM no ponto $u = u_c = 1$, assim como a cadeia quântica, são invariantes conforme. Esta Invariância sugere então, algumas relações exatas para o RPM no caso $u = 1$. A densidade local de aglomerados $g(x, L)$, definida por meio de $K(L)$:

$$K(L) = \sum_{i=1}^L g(i, L) , \quad (2.61)$$

apresenta covariância do tipo :

$$g(x, L) = L^{-(1-\alpha)} G(x/L) \quad (2.62)$$

onde $\alpha = 2/3$. Em (15) é proposto um ansatz para $G(x, L)$ baseado em invariância conforme para sistemas críticos invariante conforme confinados:

$$g(x, L) = L^{-1/3} \left[\frac{\text{sen}(\pi x/L)}{\pi} \right]^{-1/3} C \left(\cos(\pi x/L) \right) , \quad (2.63)$$

Sendo $C(x)$ em geral uma função. No modelo RPM em que $u = 1$ obtem-se que C é constante e com valor:

$$C = -\frac{\sqrt{3}}{6\pi^{5/6}} \Gamma(-1/6) = 0.753149... . \quad (2.64)$$

Este resultado concorda com as simulações de Monte Carlo mostradas na figura 14. No

caso $u > 1$, a análise numérica feita em (15) mostra que $g(x, L)$ continua tendo a forma 2.62, mas com o valor de α variando continuamente. Ou seja, o sistema, para $u > 1$, continua sendo invariante de escala.

Figura 14 – A função de escala $C\left(\cos(\pi x/L)\right)$, definida em 2.63.

Por meio de uma análise temporal do sistema é possível obter valores para o expoente crítico dinâmico z , considerando a equação 1.20. Claro, para cumprir esta relação, o sistema tem que ser invariante de escala, vamos considerar aqui a seguinte definição para as grandezas que caracterizam a interface:

$$A(t, L) = \frac{a(t, L)}{a(L)} - 1, \quad (2.65)$$

onde $a(t, L)$ pode ser qualquer grandeza das que são definidas na equação 2.54, e $a(L)$ é o valor dessa grandeza no estado estacionário. No caso do modelo crítico, o comportamento esperado da grandeza é obtido usando-se a relação 1.20:

$$A(t, L) \sim A(t/L^z). \quad (2.66)$$

A figura 15 mostra o colapso dos dados obtidos em simulações de Monte Carlo para $a(t, L) = \langle K \rangle(t, L)$, no caso $u = 1$ e para diferentes tamanho da rede. O expoente crítico dinâmico toma o valor $z = 1$, em concordância com o valor predito por invariância conforme (ver seção 2.5.1).

Na referência (14), o expoente dinâmico z é obtido para valores de $u > 1$. Os dados mostram que, para as diferentes grandezas, o expoente dinâmico z varia de forma contínua, e toma valores que vão desde $z = 1$ até $z = 0$ para valores de u entre 1 e $w = 1/u \rightarrow 0$. Neste último caso $u_d \ll u_a$, e a interface atinge estados como os mostrados na figura 16.

Figura 15 – Colapso dos dados do número de aglomerados $\langle k(t, L) \rangle$, para diferentes tamanhos do sistema. Confirma-se nesta curva o valor do expoente crítico dinâmico $z = 1$

Observa-se do gráfico, que uma perturbação (queda de um bloco) feita nas bordas, no caso de desorção, tem efeito sobre todo o sistema. No limite $L \rightarrow \infty$, a velocidade de propagação da informação seria infinita.

Figura 16 – Configurações típicas no estado estacionário para $w = 0.00025$, e diferentes tamanhos da rede. $h(x)$ é a altura média no sítio x .

2.5.4 Avalanches e a fase SOC

Bak, Tang e Wiesenfeld (BTW) em 1987 (26) argumentaram que existe uma classe de sistemas constituídos de muitas partes que interagem entre si, que embora estejam fora do equilíbrio, podem exibir um comportamento característico geral expresso por grandezas físicas cujo decaimento é descrito por leis de potência. O aspecto simplificador é que as propriedades estatísticas dos sistemas, são descritos por simples leis de potência. Em tais sistemas, este comportamento se produz sem algum “ajuste fino” externo sobre o sistema. Isto é, iniciando-se em um estado qualquer, pelas regras de evolução o sistema atinge o estado estacionário crítico. Além disso, os estados nos quais os sistemas se organizam, tem propriedades semelhantes às exibidas por sistemas em equilíbrio termodinâmico no ponto crítico. É por isso que BTW descreveram esse comportamento como Criticalidade Auto-Organizada (SOC).

O termo Auto-Organização é usado para descrever a habilidade com que certos sistemas fora do equilíbrio geram estruturas e padrões na ausência de controle ou manipulação. A palavra “criticalidade” tem um significado muito preciso em mecânica estatística do equilíbrio. Em tais sistemas as perturbações se propagam em todo o sistema, embora as interações sejam somente entre primeiros vizinhos.

Uma possível maneira de estabelecer a existência de SOC em um sistema, é fazendo-se uma perturbação e calculando-se o tamanho da resposta à mesma. No caso de SOC a mesma toma a forma de uma “reação em cadeia” ou “avalanche”. BTW usaram o modelo de pilha de areia para introduzir o conceito SOC. O modelo consiste em um conjunto de N sítios localizados nos vértices de uma rede quadrada e que são caracterizados pela altura h_i ($h_i = 1, 2, \dots$). “Grãos de areia” (unidade de altura) são adicionados aleatoriamente entre os N sítios, incrementando a altura deles. Quando a altura no sítio i , h_i , exceder uma altura crítica h_c ($h_c \geq 4$), sua altura se reduz a $h_i \rightarrow h_i - 4$. Os 4 grãos retirados do sítio i são redistribuídos igualmente entre os sítios vizinhos. Este processo pode produzir alturas maiores do que h_c nos sítios vizinhos gerando uma nova redistribuição.

A figura 17 mostra uma avalanche numa rede de $3 \times 3 = 9$ sítios, com $h_c = 4$. No instante inicial, temos a distribuição de grãos conforme mostrados na tabela da esquerda. O grão de areia atinge o ponto central e provoca uma avalanche de duração $t = 4$ e um “raio” $r = \sqrt{2}$. Quando a avalanche acabar, um novo grão é adicionado. Condição esta

Figura 17 – Avalanche no modelo de pilha de areia, com condições de fronteira aberta e $h_c = 4$.

equivalente a dizer que a taxa de adição é menor do que a taxa de relaxação, o que é usualmente considerado como uma característica das dinâmicas que exibem SOC.

Começando num estado não crítico, muitas das avalanches são pequenas, mas o tamanho delas aumenta com o tempo. Após um longo período, o sistema chega a um estado crítico, no qual, as avalanches se estendem a todos os tamanhos, tanto espaciais como temporais (27). Neste modelo, por exemplo, pode ser provado que o tempo de vida médio das avalanches é dado por uma lei de potências:

$$\langle t \rangle \sim r^\beta, \quad (2.67)$$

onde t é o tempo de duração da avalanche e r é a máxima distância atingida pela avalanche desde o ponto de origem. β é um dos expoentes críticos que caracteriza o comportamento do modelo.

No caso unidimensional (27), a distribuição de probabilidade das avalanches escala da mesma forma sugerida em 1.20, ou seja, a probabilidade da avalanche chegar até o sítio s , é dada por:

$$Prob(s; L) \simeq L^{-\alpha} f(s/L^D), \quad (2.68)$$

onde L é o tamanho do sistema, $\alpha = 2$ e $D = 2$.

Consideremos agora o RPM. Nos casos em que o modelo é crítico ($u \geq 1$) os processos de desorção são não locais produzindo evaporação de um número grande de blocos, formando grandes avalanches. Assim, o modelo possui características parecidas com aqueles modelos que apresentam avalanches e SOC.

As avalanches são estudadas perturbando-se o sistema no estado estacionário. No RPM as avalanches estarão caracterizadas pelo número de blocos desprendidos T em um processo de desorção. Esse número de blocos é sempre um número ímpar, por tanto, é conveniente definir-se o parâmetro v como : $T = 2v - 1$, onde $v = 1, 2, 3, \dots$

Vamos denotar por $S(v, L)$ a distribuição de probabilidade para uma avalanche de

“tamanho v ” em um sistema de tamanho L , esperando que tome a forma da equação 2.68:

$$S(v, L) = L^{-\tau} f(v/L^D), \quad (2.69)$$

onde D e τ são os expoentes críticos que caracterizam a distribuição. Em (13) os autores estimaram, a partir dos momentos da distribuição, os valores $D = 1$ e $\tau = 3$, para o caso $u = 1$. O valor $D = 1$ é esperado de invariância conforme, sendo L a única grandeza que caracteriza o sistema. Assumindo o valor $D = 1$, eles encontraram o colapso de dados para a função $f(x)$ para valores de L desde $L = 8$ até $L = 18$, com o valor de $\tau = 3.2$.

Em (14) os valores $D \approx 1$ e $\tau \approx 3$ são corroborados mediante simulações de Monte Carlo. Em (14) foram também estudadas avalanches para o caso $u \neq 1$. Os autores estudam as propriedades das avalanches no intervalo $0 < w = 1/u < 1$, onde a densidade de aglomerados, como no caso $u = 1$, não é nula. As simulações de Monte Carlo mostram que neste intervalo o valor de D permanece igual ($D \approx 1$) e τ muda do valor $\tau \approx 3$ para $u = w = 1$, até $\tau \approx 2$ para $w \approx 0$.

A presença de funções de distribuição do tipo 2.69 nas avalanches, indica que o sistema é invariante de escala no intervalo $1 > w > 0$. No intervalo $0 < u < 1$, onde o sistema é massivo, a distribuição de probabilidade tem um decaimento exponencial e não algébrico, como no caso anterior (14), portanto, nesse intervalo o sistema não apresenta invariância de escala.

O tamanho médio das avalanches pode ser estudado se considerarmos a quantidade $n(L)$, definida em 2.54, e que toma valores desde $1/(L-1)$, para o “triângulo”, até 1 para o “substrato” (ver figura 18).

Figura 18 – Valores limites tomados pela variável $n(L)$, em uma rede de tamanho $L = 14$.

O conhecimento de $n(L)$ serve para construir quantidades relacionadas com o número médio de avalanches no sistema no seu estado estacionário. Por exemplo, no caso $u = 1$, a conjectura dada pela equação 2.55, para a fração de sítios que não apresentam desorção, no estado estacionário, já foi testada em simulações de Monte Carlo.

Vamos definir P_a como a probabilidade média de se apresentar absorção na queda de um bloco, P_r a probabilidade média do bloco ser refletido e P_d a probabilidade média do bloco cair em um sítio de possível desorção. O número médio de blocos que se desprendem em uma avalanche, em uma rede de tamanho L , $\langle T \rangle_L$, pode ser escrita em termos de P_a e P_d .

Na queda de N blocos, um número NP_a são absorvidos, e $\langle T \rangle_L P_d N$ são desprendidos da interface. Como em estado estacionário o número médio de blocos permanece igual, temos que: $\langle T \rangle_L P_d N = NP_a$, e portanto:

$$\langle T \rangle_L = P_a / P_d . \quad (2.70)$$

Agora, P_a , P_r e P_d podem ser escritos em função de $n(L)$. A diferença entre o número de sítios que apresentam absorção e o número de picos do sistema é igual a 1 sendo o número de picos sempre maior. A soma entre esses dos tipos de sítios nos dá $n(L)$. É por isso que a probabilidade média P_a pode ser escrita como:

$$P_a = \frac{n(L)}{2} - \frac{1}{2(L-1)} . \quad (2.71)$$

A probabilidade média P_r fica um pouco mais complicada porque às vezes um bloco é refletido num sítio de possível desorção. Além da parte $n(L)/2 + 1/2(L-1)$, tem que ser adicionada a parte da reflexão nos sítios de desorção:

$$P_r = \frac{n(L)}{2} + \frac{1}{2(L-1)} + (1 - n(L))(1 - w) , \quad (2.72)$$

onde $(1 - n(L))$ é a fração dos sítios que apresentam desorção, e $(1 - w)$ é a probabilidade de reflexão nesses sítios (aqui, $u = 1/u_d = 1/w$). É claro que $P_a + P_r + P_d = 1$. Substituindo na equação 2.70, obtemos:

$$\langle T \rangle_L = \frac{n(L)/2 + 1/2(L-1)}{(1 - n(L))w} . \quad (2.73)$$

Tomando o limite $L \rightarrow \infty$, temos:

$$\langle T \rangle_\infty = \frac{n_\infty}{2(1 - n_\infty)w} . \quad (2.74)$$

No caso $w = 1$, onde $n(L)$ é dado pela equação 2.55 (e portanto $n_\infty = 3/4$), $\langle T \rangle_\infty = 3/2$.

A equação 2.74 foi testada mediante simulações de Monte Carlo em (14), onde também

se propôs um comportamento assintótico para $n(L)$:

$$n(L) = n_\infty (1 - A(w)/L + \dots) , \quad (2.75)$$

onde $A(1) = 1/6$, e $A(w)$ diverge para $w \rightarrow 0$.

2.5.5 Diagrama de fase do RPM

Baseados nas análises anteriores, podemos construir o diagrama de fases do modelo. Uma tentativa de construção do diagrama foi feita em (13), onde os autores se basearam na diagonalização exata do hamiltoniano H para redes pequenas. Em (14) e (15) um novo diagrama foi obtido, nesta vez, através de simulações de Monte Carlo. Vamos fazer aqui um pequeno resumo do diagrama, mostrado na figura 19

Figura 19 – Diagrama de fase do RPM.

No intervalo $0 < u < 1$ o sistema apresenta uma fase massiva, ou seja, a densidade de aglomerados é finita e diferente de zero. Em $u = 1$ o sistema é invariante conforme com expoente crítico dinâmico $z = 1$ e expoente crítico $\alpha = 2/3$. Uma segunda fase ($u > 1$), chamada de fase SOC por apresentar avalanches, apresenta invariância de escala (fase não massiva) com expoentes críticos variando continuamente. O expoente crítico dinâmico começa no valor $z = 1$ para $u = u_c = 1$ e muda continuamente até $z \approx 0$ para $w = 1/u \rightarrow 0$. O expoente α vai de $2/3$ para $u = 1$ até $\alpha = 0$ para $w \rightarrow 0$. (No valor $w = 0$ o sistema é massivo como para $u < 1$ (13).)

3 *Extensão do Modelo Rase and Peel*

Neste capítulo introduziremos uma extensão do RPM, inspirada na álgebra de Temperley-Lieb 3.1, para valores arbitrários de q . A extensão é motivada pela crença de que este novo modelo possui características parecidas com o RPM no caso $u = 1$.

Iniciamos descrevendo a extensão detalhadamente, escrevendo o Hamiltoniano do modelo. E finalizamos com alguns resultados relevantes vindos de simulações de Monte Carlo, e que servem para analisar quantitativamente e qualitativamente o modelo.

3.1 Descrição do Modelo

Como vimos no capítulo anterior, o modelo Rase and Peel (RPM) possui um diagrama de fase com muitas propriedades interessantes. Em particular possui no ponto em que $u = 1$, a propriedade de invariância conforme. Nesse ponto, o espectro do hamiltoniano, que descreve a evolução em tempo contínuo do sistema, é dado pelos caracteres da álgebra de Virasoro (11) (o que implica que seja invariante conforme com expoente crítico dinâmico $z = 1$). Além disso, o modelo apresenta avalanches, sendo assim um modelo do tipo SOC.

No ponto $u = 1$, o RPM é descrito pelas relações entre os geradores da álgebra de Temperley Lieb 2.19, que repetiremos aqui:

$$e_i^2 = (q + q^{-1})e_i \quad e_i e_{i\pm 1} e_i = e_i \quad [e_i, e_j] = 0 \quad \text{para } |i - j| \geq 2, \quad (3.1)$$

com $(q + q^{-1}) = 1$.

O operador de evolução que descreve a dinâmica do sistema está dada pelo hamiltoniano 2.20,

$$H = \sum_{i=1}^{L-1} (1 - e_i) = (L - 1) - \sum_{i=1}^{L-1} e_i . \quad (3.2)$$

Conforme vimos na seção 2.3, este operador atua no ideal à esquerda definido em 2.21. As palavras neste ideal tem uma bijeção com o conjunto das trajetórias RSOS, introduzidas na página 36. A construção do espaço, onde o hamiltoniano atua, depende da definição do ideal 2.21 e das relações 3.1, portanto, também depende do valor de $(q + q^{-1})$.

A extensão do RPM estudada nesta dissertação está inspirada no fator $(q + q^{-1})$ que aparece nas relações 3.1. Para isso, definimos a quantidade $p = (q + q^{-1})$ e a usamos para construir um novo hamiltoniano, que descreve um processo estocástico e que atua no mesmo espaço das trajetórias RSOS usado anteriormente.

Para a introdução do modelo é conveniente construir a matriz associada ao hamiltoniano 3.2, na representação das trajetórias RSOS. Seja $|\psi\rangle$ um estado qualquer, que pertence ao espaço das trajetórias RSOS. O elemento da diagonal, associado com este estado, pode ser calculado como:

$$\begin{aligned} \langle \psi | H | \psi \rangle &= \langle \psi | (L - 1) | \psi \rangle - \langle \psi | \left(\sum_{i=1}^{L-1} e_i \right) | \psi \rangle \\ &= (L - 1) - \langle \psi | \left(\sum_{i=1}^{L-1} e_i \right) | \psi \rangle . \end{aligned} \quad (3.3)$$

Na representação das trajetórias cada gerador e_i significa a queda de um bloco no sítio i do estado ψ . Para que o termo que tem o operador $(\sum_{i=1}^{L-1} e_i)$ na equação 3.3 seja diferente de zero, é preciso que sua ação sobre $|\psi\rangle$ seja proporcional a ele mesmo. Os geradores $\{e_i\}$ que produzem esse efeito são aqueles blocos que caem nos “picos” do estado $|\psi\rangle$. Na figura 20 é mostrado um exemplo numa rede de tamanho $L = 14$. Nesse caso, os blocos que representam os operadores e_3 , e_5 , e_9 e e_{12} são refletidos, deixando invariante o estado. Portanto, o valor do segundo termo na equação 3.3 dependerá no número de picos N_p da configuração.

Da primera relação de 3.1 obtemos que $e_i^2 = p e_i$. Daí, que o valor da diagonal da matriz H na equação 3.3, associado com o estado $|\psi\rangle$, esteja dado por:

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = (L - 1) - p N_p , \quad (3.4)$$

onde L é o tamanho da rede, p é um novo parâmetro do modelo e N_p é o número de

Figura 20 – Trajetória de tamanho $L = 14$ como 4 picos. A queda dos blocos representa a ação dos geradores nesse estado.

picos da configuração. Os elementos fora da diagonal são produzidos por absorções ou dessorções, que não envolvem a variável p , e ficariam com os mesmo valores do RPM usual.

No caso do RPM usual os elementos da diagonal no RPM podem ser escritos como $H_{aa} = (L - 1) - N_p$. Mais ainda, como a matriz é estocástica, ou seja $\sum_a H_{ab} = 0$, a soma dos elementos fora da diagonal das colunas tem que ser $-[(L - 1) - N_p]$.

Para que o novo modelo seja um modelo estocástico devemos forçar a condição $\sum_a H_{ab} = 0$. Como todos os elementos fora da diagonal possuem o mesmo valor e como o número deles é $(L - 1) - N_p$, satisfazemos tal condição associando aos elementos não diagonais o valor:

$$x = \frac{(L - 1) - pN_p}{(L - 1) - N_p}. \quad (3.5)$$

Assim, é fácil ver que:

$$\sum_a H_{ab} = (L - 1) - pN_p + \frac{(L - 1) - pN_p}{(L - 1) - N_p} \times \{ -[(L - 1) - N_p] \} = 0 \quad (3.6)$$

Obtemos assim, um novo modelo estocástico com um novo parâmetro p , que por simplicidade denotaremos por RPM- p .

Como exemplo, vamos construir a matriz estocástica no caso $L = 6$, onde o espaço das trajetórias RSOS tem dimensão $C_3 = 5$. Os elementos da diagonal estão dados pelo número de picos N_p dos estados, e o parâmetro p , segundo a equação 3.4. Os elementos fora da diagonal, da coluna i por exemplo, estão dados pelo número de picos do estado que representa esta coluna, e do parâmetro p .

A matriz toma a forma:

$$H_{ab} = - \begin{pmatrix} -(5-3p) & \frac{2(5-2p)}{3} & \frac{2(5-2p)}{3} & 0 & \frac{2(5-1p)}{4} \\ \frac{5-3p}{2} & -(5-2p) & 0 & \frac{(5-2p)}{3} & 0 \\ \frac{5-3p}{2} & 0 & -(5-2p) & \frac{(5-2p)}{3} & 0 \\ 0 & \frac{(5-2p)}{3} & \frac{(5-2p)}{3} & -(5-2p) & \frac{2(5-1p)}{4} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{(5-2p)}{3} & -(5-1p) \end{pmatrix}, \quad (3.7)$$

e o espaço das trajetórias RSOS, assim como no caso usual do RPM, está representado pelas interfaces:

$$\begin{array}{lll} |1\rangle : \text{---} \triangle \text{---} \triangle \text{---} \triangle \text{---} & |2\rangle : \text{---} \triangle \text{---} \triangle \text{---} & |3\rangle : \text{---} \triangle \text{---} \triangle \text{---} \\ |4\rangle : \text{---} \triangle \text{---} \triangle \text{---} & |5\rangle : \text{---} \triangle \text{---} \triangle \text{---} & \end{array}, \quad (3.8)$$

O número de picos do estado $|2\rangle$ é $N_p = 2$, e o elemento da diagonal toma o valor $H_{22} = (L-1) - pN_p = 5 - 2p$. O primeiro elemento de sua coluna, a coluna 2, está dado pelo número de vezes que o estado $|2\rangle$ vai para o estado $|1\rangle$, e o valor de x da equação 3.5; ou seja: $N(|2\rangle \rightarrow |1\rangle) = 2$, e $x = [(L-1) - pN_p]/[(L-1) - N_p] = (5-2p)/3$, e portanto $H_{12} = -2 \times (5-2p)/3$. O RPM-p se reduz ao RPM com $u = 1$, no caso $p = 1$. Note-se que no caso $p = 1$, a matriz 3.7 é exatamente igual à matriz dada pela equação 2.28.

Do Hamiltoniano 3.7 vemos que um aumento no parâmetro p causa uma diminuição nas taxas de transição. Podemos fazer uma interpretação simples do parâmetro p se fazemos uma análise em tempo discreto. Deixaremos cair um bloco e tentaremos calcular a probabilidade de ele atingir algum pico. O número de formas nas quais um estado “vai” para todos os outros é igual ao elemento da diagonal 3.4, e o número de possibilidades é $(L-1)$; portanto, a probabilidade do bloco atingir algum sítio que não seja pico P_{np} , está dada por:

$$P_{np} = \frac{(L-1) - pN_p}{L-1}, \quad (3.9)$$

consequentemente a probabilidade de se atingir pico é:

$$P_p = 1 - \frac{(L-1) - pN_p}{L-1} = \frac{pN_p}{L-1}. \quad (3.10)$$

Portanto, a probabilidade de atingir um pico específico é $p/(L-1)$, que se reduz ao caso do RPM (com $u = 1$) quando $p = 1$, no qual cada um dos sítios é igualmente provável. A interpretação do parâmetro p é clara: um valor maior que 1 dará uma maior probabilidade ao bloco de atingir algum dos picos, e um valor menor do que 1 dará uma chance maior

de acontecer absorção ou dessorção. Isto mimica, no caso $p \geq 1$, ao efeito Corona de descargas elétricas, onde os picos tem mais chance de serem atingidos.

Os possíveis valores do parâmetro p estão no intervalo $0 \leq p \leq 2$. O limite inferior vem da interpretação em tempo discreto: a probabilidade de se atingir um pico não pode ser menor do que zero (ver equação 3.10). Observando a matrix dada em 3.7, vemos que para certo valor de p as taxas mudam de sinal. Para o elemento H_{31} , por exemplo, se observa que o valor máximo do parâmetro p , de tal forma que o termo não mude de sinal, é $p = 5/3 \approx 1.66$. Esse valor é obtido da coluna representada pelo estado 1 da equação 3.8, que é o estado com o número maior de picos.

Em geral, o estado com maior número de picos em uma rede de tamanho L , tem $L/2$ picos. Portanto, da equação 3.5, se obtém que o máximo valor de p corresponde à solução da equação:

$$(L - 1) - \frac{pL}{2} = 0, \quad (3.11)$$

ou seja, $p_{max} = 2(L - 1)/L$. No limite $L \rightarrow \infty$, se obtém $p_{max} = 2$.

3.2 Espectro do Hamiltoniano

O objetivo agora é o cálculo de grandezas físicas como o expoente dinâmico crítico z e observar se o modelo é invariante de escala ou mesmo invariante conforme. Pretende-se também determinar o diagrama de fases do modelo como função do parâmetro p .

Obter o espectro do hamiltoniano levaria à especificação do expoente z . Mas, no caso $p \neq 1$, não existe mais um método que permita obter o espectro exatamente, como no caso $u = 1$, onde havia a conexão com a cadeia XXZ exatamente integrável. O que poderíamos fazer é calcular numericamente o espectro. O problema numérico implica na diagonalização do hamiltoniano H , que é uma matriz $N \times N$, onde N é dado pelo número de Catalan:

$$C_n = \frac{1}{n+1} \binom{2n}{n} = \frac{(2n)!}{(n+1)(n!)^2} = 1, 2, 5, 14, 42, 132, 429, 1430, 4862, \dots, \quad (3.12)$$

sendo $L = 2n$. Note-se que já no caso $L = 26$, o número de elementos da matriz é bastante grande $742900^2 \approx 5.51 \times 10^{11}$, e calcular os autovalores da matriz exige muita capacidade computacional.

A matriz H é uma matriz intensidade, que tem propriedades que podem nos ajudar a obter informação parcial acerca do seu espectro. Além disso, o espaço das configurações RSOS tem uma característica que também pode ser usada. Por exemplo, no caso $L = 6$, os estados $|2\rangle$ e $|3\rangle$, mostrados em 3.8, podem ser obtidos, um através do outro, mediante reflexão no ponto médio da rede:

(3.13)

ou seja, $\hat{R}|2\rangle = |3\rangle$, onde $\hat{R}$ é o operador de reflexão. Essa propriedade permite gerar dois subespaços; um deles com vetores simétricos e o outro com vetores anti-simétricos. Os vetores simétricos são aqueles invariantes sob reflexão, como por exemplo, o estado $|4\rangle$ de 3.8:

(3.14)

O estado $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle + |3\rangle)$, é também um estado simétrico:

$$\hat{R}|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{R}|2\rangle + \hat{R}|3\rangle) = 1/\sqrt{2}(|3\rangle + |2\rangle) = |\psi\rangle, \quad (3.15)$$

onde o fator $1/\sqrt{2}$ vem da normalização do estado.

Por outro lado, o estado $|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle - |3\rangle)$, é um estado anti-simétrico:

$$\hat{R}|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{R}|2\rangle - \hat{R}|3\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|3\rangle - |2\rangle) = -|\phi\rangle. \quad (3.16)$$

Neste caso, em que $L = 6$, o espaço dos vetores simétricos é composto pelo conjunto de estados $\{|1\rangle, \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle + |3\rangle), |4\rangle, |5\rangle\}$, de 3.8; e o espaço dos vetores anti-simétricos é dado pelo conjunto $\{\frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle - |3\rangle)\}$.

A questão importante aqui é que o conjunto de autovalores do Hamiltoniano, é com-

posto da união entre os conjuntos de autovalores gerados pelos dois subespaços ortogonais entre si. Podemos assim, construir duas matrizes, cada uma delas representando um dos subespaços, e assim obter os autovalores de cada uma, cuja união será o conjunto dos autovalores do hamiltoniano do espaço inteiro.

Novamente, vamos tomar como exemplo o caso $L = 6$, e por simplicidade $p = 1$. A matriz H é dada pela matriz 2.28. Os autovalores dessa matriz, denotados por $E_0 < E_1 < E_2 < E_3 < E_4$, são:

$$E_0 = 0, \quad E_1 = 4 - \sqrt{3}, \quad E_2 = 3, \quad E_3 = 4, \quad E_4 = 4 + \sqrt{3}. \quad (3.17)$$

O subespaço dos vetores simétricos é formado pelo conjunto:

$$\begin{aligned} |1\rangle_S &: \text{Diagram 1} & |2\rangle_S &: \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} \right) \\ |3\rangle_S &: \text{Diagram 4} & |4\rangle_S &: \text{Diagram 5} \end{aligned} \quad (3.18)$$

A ação do hamiltoniano 3.2 sobre este subespaço gera a matriz H_S , dada por:

$$H_S = \begin{pmatrix} 2 & -2\sqrt{2} & 0 & -2 \\ -2\sqrt{2} & 3 & -\sqrt{2} & 0 \\ 0 & -2\sqrt{2} & 3 & -2 \\ 0 & 0 & -1 & 4 \end{pmatrix}, \quad (3.19)$$

a qual tem o seguinte conjunto de autovalores:

$$\lambda_0^S = 0, \quad \lambda_1^S = 4 - \sqrt{3}, \quad \lambda_2^S = 4, \quad \lambda_3^S = 4 + \sqrt{3}. \quad (3.20)$$

O espaço dos vetores anti-simétricos é um conjunto unitario, formado pelo vetor:

$$|1\rangle_{NS} : \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\text{Diagram 6} - \text{Diagram 7} \right), \quad (3.21)$$

que gera a matriz:

$$H_{NS} = \begin{pmatrix} 3 \end{pmatrix}, \quad (3.22)$$

cujo único autovalor é : $\lambda^{NS} = 3$, e portanto, a união dos dois conjuntos dá o conjunto completo de autovalores 3.17.

O espaço dos vetores simétricos contém o estado estacionário com autovalor zero (que é um autovalor conhecido, devido ao fato de H ser uma matriz intensidade), e o “primeiro estado excitado” $E_1 = 4 - \sqrt{3}$, enquanto o espaço dos vetores anti-simétricos contém

o “segundo estado excitado” $E_2 = 3$. Este fato continua sendo verdadeiro para valores arbitrários de p no RPM-p, e aparentemente para tamanhos arbitrários L da rede.

Obter todos os autovalores do hamiltoniano é uma tarefa difícil, que consiste em diagonalizar uma matriz muito grande. Podemos contudo, calcular os autovalores extremos de matrizes relativamente grandes usando o método da potência.

Os autovalores do hamiltoniano, que é uma matriz intensidade, possuem parte real positiva e tem o autovalor zero como o autovalor com a menor parte real. O método da potência consegue calcular o autovalor da matriz de maior módulo da seguinte forma. Consideremos um “bra” qualquer $\langle\phi|$ e um estado qualquer $|\psi\rangle$, que é combinação linear dos vetores da base $|n\rangle$:

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^N c_n |n\rangle . \quad (3.23)$$

Calculemos agora a quantidade:

$$\begin{aligned} \frac{\langle\phi|H^m|\psi\rangle}{\langle\phi|H^{m-1}|\psi\rangle} &= \frac{\langle\phi|\sum_{n=1}^N c_n E_n^m |n\rangle}{\langle\phi|\sum_{n=1}^N c_n E_n^{m-1} |n\rangle} = \frac{\sum_{n=1}^N c_n E_n^m \langle\phi|n\rangle}{\sum_{n=1}^N c_n E_n^{m-1} \langle\phi|n\rangle} \\ &= E_N \frac{\left(c_N \langle\phi|N\rangle + \sum_{n=1}^{N-1} c_n \langle\phi|n\rangle \frac{E_n^m}{E_N^m}\right)}{\left(c_N \langle\phi|N\rangle + \sum_{n=1}^{N-1} c_n \langle\phi|n\rangle \frac{E_n^{m-1}}{E_N^{m-1}}\right)} \end{aligned} \quad (3.24)$$

onde E_N é o maior autovalor em módulo que corresponde ao autovetor $|N\rangle$. No limite $m \rightarrow \infty$, $E_n^m / E_N^m \rightarrow 0$ se $m \neq n$, e podemos escrever:

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{\langle\psi|H^m|\psi\rangle}{\langle\psi|H^{m-1}|\psi\rangle} = E_N . \quad (3.25)$$

Consideraremos agora um novo hamiltoniano H' , construído a partir do anterior:

$$H' = \alpha \hat{I} - H , \quad (3.26)$$

onde α é uma constante e $\hat{I}$ é o operador identidade. H' compartilha os autovetores com H , e os autovalores também estão relacionados:

$$H'|\psi_n\rangle = (\alpha \hat{I} - H)|\psi_n\rangle = \alpha|\psi_n\rangle - E_n|\psi_n\rangle = (\alpha - E_n)|\psi_n\rangle , \quad (3.27)$$

onde $|\psi_n\rangle$ é o autovetor de H que está relacionado com o autovalor E_n . Como vemos, os autovalores do hamiltoniano H' são: $E'_n = \alpha - E_n$.

Sabemos que os autovalores da matriz H podem ser escritos na forma: $E_0 = 0 < |E_1| < |E_2| < \dots < |E_{N-1}| < |E_N|$, portanto, os autovalores de H' estariam dados por:

$|\alpha - E_N| < |\alpha - E_{N-1}| < \dots < |\alpha - E_1| < \alpha$. Se α for maior do que o maior autovalor de H , todos os autovalores de H' também teriam parte real positiva.

O espaço dos vetores simétricos tem também o zero como menor autovalor, e o espaço dos vetores anti-simétricos possui o segundo estado excitado E_2 como menor autovalor. Poderíamos então, usando o resultado 3.25, a definição 3.26 e a matriz dos vetores anti-simétricos, obter um valor aproximado do segundo estado excitado, com autovalor E_2 .

No caso $u = 1$ do RPM, o sistema é invariante conforme, e o espectro para redes grandes (no limite de escala de tamanho finito ou “Finite-size Scaling limit”), tem a forma:

$$E = \pi v_s k / L + o\left(\frac{1}{L}\right), \quad (3.28)$$

onde $k = 2, 3, \dots$, $o(1/L)$ representa as correções na variável $1/L$ e v_s é a velocidade do som, que neste caso toma o valor $v_s = 3\sqrt{3}/2$.

Figura 21 – LE_2 contra $1/L$ para o RPM, para alguns valores do parâmetro u . São mostradas as curvas para $L = 6, 8, 10, \dots, 26$.

A motivação deste trabalho vem da esperança de que a extensão do RPM possa ter as mesmas características de simetrias internas do RPM no caso $u = 1$. O RPM neste ponto é invariante conforme, e seu espectro, no limite de redes grandes, é dado por 3.28. Para testar invariância conforme do RPM-p devemos tentar achar o espectro para depois tomar o limite de redes grandes e verificar se os “gaps” obedecem às previsões da invariância conforme para sistemas finitos.

Figura 22 – LE_2 contra $1/L$ para alguns valores do parâmetro p no modelo RPM-p.

Primeiramente vamos considerar o RPM usual para valores arbitrários do parâmetro u . Conseguimos neste trabalho estender os resultados anteriores que calcularam cadeias de até $L = 18$ sítios (13). Calculamos o segundo estado excitado para redes de até 26 sítios. No apêndice A mostramos algumas técnicas necessárias para a implementação do algoritmo de diagonalização do hamiltoniano. Na figura 21, é mostrada a curva de LE_2 contra $1/L$ para diferentes valores de u . Note-se que o único valor de u que parece ter convergência é 1, que se aproxima ao valor $9\pi\sqrt{3}/2 \approx 24.4863$, como predito em 3.28 para $k = 3$ (ou seja $E = E_2$).

Os resultados obtidos para o RPM-p mostram características diferentes. Na figura 22 são mostradas as curvas obtidas para redes de até $L = 26$ sítios, para diferentes valores de p . As curvas parecem convergir para todos esses valores de p . Este resultado é interessante porque sugere que o modelo estendido é invariante conforme para todo valor do parâmetro p , e que consequentemente o expoente dinâmico crítico toma o valor $z = 1$.

Neste caso, os distintos valores obtidos para $L \rightarrow \infty$ seriam devidos ao fato da velocidade do som da equação 3.28 depender de p , ou seja $v_s = v_s(p)$. Caso o modelo RPM-p seja invariante conforme, os valores de E_2 para $L = 6, 8, 10, \dots, 26$ nos permitem estimar a velocidade do som $v_s(p)$ para os vários valores de p . Na tabela 1 mostramos os valores obtidos por extrapolações numéricas dos resultados. A extrapolação usada é a de Van den Broeck e Schwartz (28).

Tabela 1 – Extrapolação dos dados para E_2L . São mostrados os valores obtidos para $v_s(p)$ e a sua relação com $v_s(1) = 3\sqrt{3}/2$, para alguns valores de p .

p	$\lim_{L \rightarrow \infty} E_2L$	$v_s(p)/v_s(1)$	$v_s(p)$
0.1	37.755	1.542	4.005
0.2	36.267	1.481	3.848
0.3	34.795	1.420	3.692
0.4	33.320	1.361	3.535
0.5	31.846	1.301	3.379
0.6	30.368	1.240	3.222
0.7	28.887	1.180	3.065
0.8	27.407	1.119	2.908
0.9	25.932	1.060	2.751
1.0	24.461	0.998	2.595
1.1	23.012	0.940	2.442
1.2	21.566	0.881	2.288
1.3	20.195	0.825	2.143
1.4	18.646	0.761	1.978
1.5	17.186	0.701	1.823

Na seguinte seção estudaremos grandezas físicas, tanto no regime transiente (dependentes no tempo) como no estado estacionário, que nos permitirão detetar a invariância conforme do modelo para diferentes valores de p .

3.3 Espaço e Tempo

Como já vimos na seção 2.5.3, varias grandezas físicas caraterizam o sistema no espaço e no tempo:

$$\begin{aligned}
 K(t, L) &= \sum_{i=1}^L g(i, L) = \left\langle \sum_{j=1}^L \delta_{h_j, 0}(t) \right\rangle, \\
 h(t, L) &= \frac{1}{L} \left\langle \sum_{i=1}^L h_i(t) \right\rangle, \\
 h_{1/2}(t, L) &= \langle h_{L/2}(t) \rangle,
 \end{aligned}
 \tag{3.29}$$

onde $K(L, t)$ é o número de aglomerados, $g(x, L)$ é a densidade local de aglomerados, $h(L, t)$ a altura média e $h_{1/2}(L, t)$ a altura no ponto médio da rede. As quantidades entre $\langle \rangle$ correspondem a valores médios num conjunto estatístico de interfaces no tempo t .

Neste trabalho, as grandezas físicas dependentes do tempo são estudadas mediante simulações de Monte Carlo. O comportamento típico das quantidades físicas é mostrado na figura 23. No começo se observa um estado transitório, para logo atingir um estado “estacionário” independente do tempo, e que também não depende das condições iniciais do sistema.

Na figura 23 mostramos, no caso de uma rede de $L = 512$, um caso típico da evolução do número de aglomerados $K(t, L)$ e da altura $h(t, L)$, para duas condições iniciais diferentes, o substrato:

$$(3.30)$$

e o “triângulo perfeito”:

$$(3.31)$$

Usando o substrato 3.30 como estado inicial, no caso do número de aglomerados, se obtém uma curva que começa com o número máximo de aglomerados $L/2 = 256$ e desce até atingir o estado estacionário. No triângulo perfeito, o número de aglomerados é o mínimo, ou seja $K(0, L) = 1$. No caso da altura $h(t, L)$, é o triângulo o estado que apresenta o maior valor inicial.

Vimos na seção 3.2 que, possivelmente, o modelo estendido apresente invariância conforme para todos os valores do parâmetro p ($0 \leq p < 2$), e que o valor do expoente crítico dinâmico seja também $z = 1$. Se o sistema for invariante de escala, as quantidades físicas que o caracterizam tomarão a forma da relação de Family Vicsek (16):

$$w(L, t) \sim L^\alpha f\left(\frac{t}{L^z}\right). \quad (3.32)$$

Isso implica em um colapso dos dados se desenharmos as quantidades físicas em função de t/L^z para redes de diferente tamanho L . Para o número de aglomerados $K(t, L)$, a

Figura 23 – Mostra-se à esquerda o número de aglomerados e à direita a altura média como função do tempo. As curvas correspondem ao estado inicial sendo o substrato (preto) e o triângulo (vermelho). Os dados foram obtidos fazendo-se média com 2000 amostras com o valor do parâmetro $p = 0.5$ e a rede com $L = 512$ sítios.

quantidade:

$$A(t, L) = \frac{K(t, L)}{K_{\infty}(L)} - 1, \quad (3.33)$$

mostra o colapso para alguns valores do parâmetro p no intervalo $0 < p < 2$ em redes de tamanho $L = 1024, 2048, 4096$ e 8192 . Tal colapso é obtido supondo-se que o expoente dinâmico crítico toma o valor $z = 1$, indicando assim invariância conforme no modelo. Os resultados são mostrados na figura 24 para o caso em que temos como condição inicial o substrato.

Invariância conforme faz uma predição ao respeito do estado estacionário no número de aglomerados $K(L)$ (15); para o RPM com $u = 1$ tem-se:

$$K(L) \approx \frac{\Gamma(1/3)\sqrt{3}}{2\pi} L^{2/3} \approx 0.738489 L^{2/3} \quad (L \rightarrow \infty), \quad (3.34)$$

ou seja, o expoente crítico $\alpha = 2/3$. Simulações de Monte Carlo mostram que o expoente crítico α , no caso do RPM-p, toma valores muito perto de $2/3$ para valores de p em todo o seu possível intervalo. A figura 25 mostra a regressão linear feita sobre dados tomados no estado estacionário para $p = 0.5$ e redes de até $L = 32768$ sítios. Tomando o logaritmo na equação 3.34, obtemos:

$$\ln [K(L)] \approx \ln(0.738489) + \frac{2}{3} \ln(L) = \ln(\beta) + \alpha \ln(L). \quad (3.35)$$

Figura 24 – Colapso das funções do número de aglomerados para redes de tamanho $L = 1024, 2048, 4096$ e 8192 , e $p = 0.1, 0.5, 0.9, 1.25, 1.5$ e 1.9 .

Tabela 2 – O número de aglomerados $K(L)$ no limite $L \rightarrow \infty$, para diferentes valores do parâmetro p .

p	β	α
0.1	0.722801	0.6691
0.9	0.745306	0.6650
1.1	0.734261	0.6669
1.25	0.752029	0.6638
1.5	0.738872	0.6661
1.9	0.723771	0.6691

No caso $p = 0.5$ obtivemos o valor $\ln(\beta) = -0.32527$, e podemos escrever:

$$K(L) = 0.722332 L^{0.669} \quad (L \rightarrow \infty) . \quad (3.36)$$

Na tabela 2 são mostrados os valores de α e β da função 3.35 para diferentes valores do parâmetro p . Os dados sugerem que não só $\alpha = 2/3$ como também a amplitude é muito próxima ao caso $p = 1$. Outra predição de invariância conforme envolve a densidade local de aglomerados $g(x, L)$ definida em 3.29 (ver 2.63):

$$g(x, L) = L^{-1/3} \left[\frac{\text{sen}(\pi x/L)}{\pi} \right]^{-1/3} C , \quad (3.37)$$

Onde C , que poderia ser uma função de $\cos(\pi x/L)$, é uma constante com:

$$C = -\frac{\sqrt{3}}{6\pi^{5/6}} \Gamma(-1/6) = 0.753149... . \quad (3.38)$$

Figura 25 – Cálculo do expoente crítico α relativo à distribuição de aglomerados, no caso $p = 0.5$. As redes usadas correspondem a tamanhos que vão desde $L = 1024$ até $L = 32768$.

Figura 26 – A função $g(x, L)$ em redes de tamanho $L = 1024, 2048, 4096$, e 8192 . O gráfico da esquerda é para $p = 0.5$ e o da direita para 1.5 .

A figura 26 mostra a função $g(x, L)$ para dois valores do parâmetro p . O valor de $g(x, L)$ para pontos distintos das bordas é quase constante, e decresce com o aumento do tamanho da rede. Na seção 2.5.3 foi mostrado o resultado obtido para a constante C em simulações de Monte Carlo, no RPM para $u = 1$. Para o RPM-p, simulações mostram resultados parecidos em todo o intervalo possível do parâmetro p . As figuras 27 e 28 mostram os resultados obtidos para a constante C do ansatz 3.37 (e o valor médio dela) nos casos $p = 0.1, 0.5, 1.5$, e 1.9 , e redes de $L = 1024, 2048, 4096$ e 8192 . Vemos dos resultados destas figuras que a constante C é provavelmente independente de p , e dada por 3.38. Assim nossos resultados implicam que o modelo RPM-p é invariante conforme em todo o

intervalo $0 \leq p \leq 2$.

Figura 27 – Valor da constante C em 3.37 para $p = 0.1$ e $p = 0.5$.

Figura 28 – Valor da constante C em 3.37 para $p = 1.5$ e $p = 1.9$.

4 Conclusões

Existem duas razões pelas quais o RPM tem recebido tanta atenção. A primeira é que a evolução temporal do sistema é dada por um hamiltoniano H cujo espectro (no caso $u = 1$), no limite de tamanho finito, é conhecido e dado por uma teoria de campo conforme com carga central $c = 0$. Como mostramos na seção 2.5.1, este fato implica que o expoente dinâmico crítico $z = 1$. Este valor do expoente dinâmico crítico coloca o RPM numa nova classe de universalidade entre os modelos de crescimento, como os modelos *Edwards-Wilkinson* (EW) e *Kardar-Parisi-Zhang* (KPZ) que têm $z = 2$ e $z = 3/2$, respectivamente (veja referência (29)).

A segunda razão tem a ver com o grande número de conjecturas sobre o estado estacionário do modelo. No estado estacionário do modelo as componentes são números inteiros. Tal fato permite relacionar o modelo, que descreve uma física de não equilíbrio, com um modelo de mecânica estatística do equilíbrio (modelo de seis vértices) à temperatura $T = 0$ em duas dimensões e também com o problema de enumeração de matrizes de sinal alternante.

Como mostramos no capítulo 2, o RPM é um modelo estocástico no qual invariância conforme (que é uma simetria espaço temporal) faz importantes previsões, como as mostradas nas equações 2.59, 2.63 e 2.64. O RPM é o primeiro modelo estocástico que apresenta este tipo de comportamento.

No capítulo 3 introduzimos um novo modelo baseado no RPM (no ponto $u = 1$), e que possui um novo parâmetro que chamamos de p , parâmetro este que controla as taxas de transição do modelo. No caso $p = 1$, o novo modelo (que chamamos aqui de RPM- p) se reduz ao RPM usual. No caso $p \neq 1$ as taxas de transição dependem do tamanho L da interface e do parâmetro p . Neste caso o sistema não é mais exatamente integrável e a função de distribuição no estado estacionário não apresenta as propriedades que o RPM tem no ponto $u = 1$.

Em uma teoria de campo conforme o espectro tem o comportamento mostrado na

equação 3.28. Com ajuda do “setor antisimétrico” do hamiltoniano do sistema, conseguimos calcular o segundo estado excitado que sugeriu que o expoente dinâmico crítico deveria ser $z = 1$. Fato que ficou confirmado analisando o comportamento temporal sistema para redes grandes, e usando a relação Family-Vicsek (equação 1.20). O colapso nos dados esteve presente em todo o domínio do parâmetro p ($0 < p < 2$).

A única diferença nos espectros para diferentes valores de p é a velocidade do som $v_s(p)$, que foi calculada para vários valores de p no seu domínio, através da extrapolação dos dados do segundo estado excitado do hamiltoniano (veja a tabela 1). Foram testadas também as previsões de invariância conforme para alguns valores do parâmetro p . Os resultados são mostrados na tabela 2 e nas figuras 27 e 28. Das semelhanças entre o RPM e o RPM-p, podemos concluir que o novo modelo RPM-p é também invariante conforme, estando ambos os modelos na mesma classe de universalidade de comportamento crítico. Este é um fato importante, pois diferentemente do hamiltoniano crítico de equilíbrio, onde a invariância conforme é presente na quase totalidade dos modelos conhecidos, no caso dos modelos de não equilíbrio este não é o caso. Acreditamos que este novo modelo seja importante para se entender os ingredientes fundamentais necessários à garantir a invariância conforme nos modelos unidimensionais críticos.

Por fim, gostaríamos de mencionar que pesquisas adicionais recentes foram feitas para o modelo RPM-p nas referências (30) e (31). Uma pesquisa natural que segue desta dissertação é o estudo do modelo RPM-p nos casos em que as taxas de absorção e desorção não são iguais. No caso do modelo RPM em que a razão u da taxa de absorção pela taxa de desorção é maior que 1, o modelo não é mais invariante conforme, mas ainda é crítico com expoente crítico dinâmico que varia continuamente $z = z(u) < 1$. Seria interessante estudar o modelo RPM-p neste caso e verificar se ainda o expoente crítico dinâmico permanece com o mesmo valor para valores arbitrários de p e se teríamos $z = z(u, p)$.

REFERÊNCIAS

- 1 VAN-KAMPEN, N. *Stochastic processes in physics and chemistry*. New York: North Holland Publishing Company, 1981. ISBN 0-444-86650-7.

- 2 RISKEN, H. *The fokker-Planck equation*. Berlin: Springer-Verlag, 1988.

- 3 GLAUBER, R. Time-dependent statistics of the Ising model. *Journal of mathematical Physics*, v. 4, n. 2, p. 294–307, Feb 1963.

- 4 GOLINELLI, O.; MALLICK, K. The asymmetric simple exclusion process: an integrable model for non-equilibrium statistical mechanics. *Journal of Physics A* , v.39, n. 41, p. 12679–12705, Sept 2006.

- 5 ALEXANDER, S.; HOLSTEIN, T. Lattice diffusion and the Heisenberg ferromagnet. *Physical Review B*, v.18, n. 1, p. 301–302, July 1978.

- 6 ALCARAZ, F. C.; DROZ, M.; HENKEL, M.; RITTENBERG, V. Reaction-diffusion processes, critical dynamics, and quantum chains. *Annals of Physics*, v.230, n. 1, p. 250–302, Mar 1994.

- 7 KIM, D. Bethe ansatz solution for crossover scaling functions of the asymmetric XXZ chain and the Kardar-Parisi-Zhang-type growth model. *Physical Review E*, v.52, n. 1, p. 3512, Jan 1995.

- 8 LEE, D.; KIM, D. Large deviation function of the partially asymmetric exclusion process. *Physical Review E*, v.59, n. 6, p. 6476–6482, June 1999.

- 9 DERRIDA, B.; LEBOWITZ, J. Exact large deviation function in the asymmetric exclusion process. *Physical Review Letters*, v.80, n. 2, p. 209–213, Jan 1998.
- 10 DERRIDA, B.; APPERT, C. Universal large-deviation function of the Kardar-Parisi-Zhang equation in one dimension. *Journal of Statistical Physics*, v.94, n. 1/2, p. 1–30, Jan 1999.
- 11 PEARCE, P.; RITTENBERG, V.; de GIER, J.; NIENHUIS, B. Temperley-Lieb stochastic processes. *Journal of Physics A*, v.35, n. 45, p. L661-L668, Nov 2002.
- 12 DE GIER, J.; NIENHUIS, B.; PEARCE, P.; RITTENBERG, V. Stochastic processes and conformal invariance. *Physical Review E*, v.67, n. 1, p. 016101, Jan 2003.
- 13 DE GIER, J.; NIENHUIS, B.; PEARCE, P.; RITTENBERG, V. The raise and peel model of a fluctuating interface. *Journal of Statistical Physics*, v.114, n. 1, p. 1–35, Jan 2004.
- 14 ALCARAZ, F. C.; LEVINE, E.; RITTENBERG, V. Conformal invariance and its breaking in a stochastic model of a fluctuating interface. *Journal of Statistical Mechanics Theory and Experiment*, n. 08003, Aug. 2006.
- 15 ALCARAZ, F. C.; RITTENBERG, V. Different facets of the raise and peel model. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, n. 07009, July 2007.
- 16 FAMILY, F.; VICSEK, T. Scaling of the active zone in the Eden process on percolation networks and the ballistic deposition model. *Journal of Physics A*, v.18, n. 2, p. L75–L81, Feb. 1985.
- 17 MARTIN, P. *Potts models and related problems in statistical mechanics*. Singapore: World Scientific, 1991.
- 18 BATCHELOR, M. T.; de GIER, J.; NIENHUIS, B. The quantum symmetric XXZ chain at $\Delta=-1/2$, alternating-sign matrices and plane partitions. *Journal of Physics A*, v.34, n. 19, p. L265, May 2001.

- 19 TEMPERLEY, H.; LIEB, E. Relations between the 'Percolation' and 'Colouring' problem and other graph-theoretical problems associated with regular planar lattices: some exact results for the 'Percolation' Problem . *Proceedings of the Royal Society A*, v.322, n. 1549, p. 251–280, Apr. 1971.

- 20 HENKEL, M. *Conformal invariance and critical phenomena*. Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 1999.

- 21 DHAR, D. Theoretical studies of Self-organized criticality. *Physica A*, v.369, n. 1, p. 29–70, May 2006.

- 22 ALCARAZ, F. C.; BARBER, M. N.; BATCHELOR, M. T; BAXTER, R. J; QUISPEL, G. R. W. Surface exponents of the quantum XXZ, Ashkin-Teller and Potts model. *Journal of Physics A*, v.20, n. 19, p. 6397–6409, Dec. 1987.

- 23 BRESSOUD, D. *Proofs and confirmations: The story of the alternating sign matrix conjecture*. Cambridge: Cambridge University Press, 1991.

- 24 KUPERBERG, G. Symmetry classes of alternating-sign matrices under one roof. *Annals of Mathematics*, v.156, n. 1, p. 835–866, Nov. 2002.

- 25 de GIER, J. Loops, matchings and alternating-sign matrices. *Discrete Mathematics*, v.298, n. 1–3, p. 365–388, Aug. 2005.

- 26 BAK, P.; TANG, C.; WEISENFELD, K. Self-organized criticality: an explanation of $1/f$ noise. *Physical Review Letters*, v.59, n. 4, p. 381–384, Jan. 1987.

- 27 DHAR, D. The Abelian sandpile and related models. *Physica A*, v.263, n. 1–4, p. 4–25, Feb. 1999.

- 28 BROECK, J-M. V.; SCHWARTZ, L. W. A one parameter family of sequence transformations. *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, v.10, p. 658–666, Jan. 1979.

29 HINRICHSSEN, H. Non-equilibrium critical phenomena and phase transitions into absorbing states. *Advances in Physics*, v.49, n. 7, p. 815–958, 2000.

30 ALCARAZ, F. C.; RITTENBERG, V. A conformal invariance growth model. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, n. P12032, Dec 2010.

31 ALCARAZ, F. C.; RITTENBERG, V. From Conformal invariance to quasistationary states (In press).

32 GAGLIANO, E.; DAGOTTO, E.; MOREO, A.; ALCARAZ, F. C. Correlations functions of the antiferromagnetic Heisenberg model using a modified Lanczos method. *Physical Review B*, v.34, n. 3, p. 1677–1682, Aug. 1986.

APÊNDICE A – Técnicas auxiliares para a diagonalização numérica de Hamiltonianos

Explicaremos aqui o algoritmo usado para calcular o segundo estado excitado do Hamiltoniano usado no capítulo 3. Um dos objetivos do programa é gerar os estados do espaço das configurações, ou seja, as trajetórias RSOS. Para isto, os estados são representados por um vetor de uns e zeros que indicam a “inclinação” de cada sítio. Os sítios 0 e 1 indicam inclinação negativa e positiva, respectivamente. Eis um exemplo de uma configuração, numa rede de tamanho $L = 6$:

(A.1)

que corresponde ao vetor:

$$l(i) = \left(0 \quad 1 \quad 1 \quad 0 \quad 0 \quad 1 \quad 0 \right) . \quad (A.2)$$

Neste caso o vetor é de tamanho 7 ($= L + 1$). A primeira componente do vetor é fixada em zero, a segunda é sempre 1 e a última é sempre 0. Cada estado é representado por um vetor e cada vetor pode ser representado por um número decimal, que no caso de A.1 seria:

$$0 \times 2^0 + 1 \times 2^1 + 1 \times 2^2 + 0 \times 2^3 + 0 \times 2^4 + 0 \times 2^5 + 1 \times 2^6 + 0 \times 2^7 = 38 . \quad (A.3)$$

Cada estado fica então representado por um número inteiro na base decimal.

É possível gerar todo o espaço das configurações RSOS começando com o substrato, e aplicando-se o Hamiltoniano no mesmo. Geram-se estados adicionais que por sua vez geram estados adicionais, até completar todo o espaço.

O conjunto de estados deve ser ordenado. Além de armazenar o número decimal

Tabela 3 – Configuração inicial da tabela que armazena os estados.

i	v_1	v_2	v_3
1	-1	0	0
2	-1	0	0
3	-1	0	0
...	...	...	...
S-2	-1	0	0
S-1	-1	0	0
S	-1	0	0

correspondente ao estado, temos que guardar a informação da posição relativa do estado com respeito aos outros estados. Uma forma simples de fazer isto é criar dois vetores e armazenar o número decimal num deles e o número da posição relativa no outro. Mas existe um problema. Sempre que um estado é gerado, ele tem que ser procurado antes para saber se ele já não foi gerado anteriormente. O número de testes que devem ser feitos cresce linearmente com o tamanho da tabela de armazenamento, o que faz o algoritmo muito ineficiente. Então, temos que procurar um melhor método para armazenar os estados. Um método mais apropriado é conhecido como o algoritmo de hashing, descrito na referência (32). A técnica baseia-se na construção da relação $i = h(k)$, chamada de função “hash” que dá a correspondência entre o estado k e o lugar i do vetor onde o estado será armazenado.

Se a relação fosse unívoca, o problema estaria resolvido, porque só calculando $h(k)$ saberíamos se já foi armazenado anteriormente na tabela de armazenamento. Mas pode acontecer que existam n diferentes valores de k tais que: $h(k_1) = h(k_2) = \dots = h(k_n)$. Encontrar uma função um a um é quase impossível, portanto, temos que introduzir um procedimento eficiente com uma certa função, para o caso em que a função é igual para dois ou mais números diferentes.

Começaremos definindo a função $h(k)$:

$$h(k) = [k(\bmod S)] + 1 , \quad (\text{A.4})$$

onde k é o número decimal que representa o estado, S é o tamanho da tabela que armazena os estados (em princípio, não conhecido), e $k(\bmod S)$ é o resto da divisão entre k e S . Tem sido mostrado que a função acima é bastante efetiva em diversas aplicações (ver referência (32)).

Para armazenar os dados, vamos usar um conjunto de vetores que formam uma tabela. A configuração inicial é mostrada na tabela 3. Tomaremos S como o tamanho da Tabela.

Assumimos para prosseguir a seguinte convenção. Quando um sítio está vazio o vetor v_1 toma o valor -1 nesse sítio. Quando um estado chega a ocupar esse sítio, o valor de v_1 passa a ser zero. No caso em que um novo estado corresponda a esse mesmo sítio (através da equação A.4) um novo sítio vazio deve ser procurado. O valor de v_1 passa a ser aquele do primeiro sítio, a contar do final da tabela, candidato a armazenar o novo estado. Assim, o vetor v_1 contém informação sobre a ocupação do sítio, e sobre a rota de busca de vetores com o mesmo valor da função hash. v_2 tem a representação decimal do estado e v_3 guarda a ordem de geração dos estados.

Quando um novo estado é gerado o sítio i é escolhido usando a equação A.4. Se o sítio estiver ocupado por um estado diferente, uma busca é iniciada. Se o estado não for encontrado, procura-se um novo sítio na tabela iniciando-se nos índices mais altos até encontrar um sítio desocupado, deixando uma “marca” no vetor v_2 , no último sítio que foi visitado antes do estado ser armazenado.

Para explicar o algoritmo, mostraremos um exemplo simples de uma rede de tamanho $L = 6$ e vetores de tamanho $S = 8$. O estado inicial é o sustrato:

$$\begin{array}{ccccccc} & 1 & & 0 & & 1 & & 0 & & 1 & & 0 \\ & \diagup & & \diagdown & & \diagup & & \diagdown & & \diagup & & \diagdown \\ 0 & & & & & & & & & & & \end{array}, \quad (\text{A.5})$$

que corresponde ao número decimal 42. Portanto, o lugar onde estado será armazenado é: $i = h(42) = [42 \text{Mod } 8] + 1 = 3$.

O seguinte estado, que é gerado pela queda de um bloco no substrato, corresponde a A.1, cujo decimal associado é 38. O lugar é dado por: $i = h(38) = [38 \text{Mod } 8] + 1 = 7$, que é um sítio vazio, portanto, armazenamos o estado nesse lugar, e v_1 toma o valor 0.

O seguinte estado gerado corresponde ao decimal 26: $i = h(26) = [26 \text{Mod } 8] + 1 = 3$. Mas é um sítio já ocupado. Então o estado é enviado ao final da tabela, ao sítio 8. Número que é deixado como marca no sítio 3 do vetor v_1 .

O seguinte estado é 22. O lugar é dado por: $i = h(22) = [22 \text{Mod } 8] + 1 = 7$, que já está ocupado. Portanto, vai ficar no sítio 6, deixando a marca no sítio 7 de v_1 . O seguinte estado gerado é 14, $i = h(14) = [14 \text{Mod } 8] + 1 = 7$. O estado vai pulando até se instalar no sítio 5, deixando a marca no sítio 6 de v_1 . Na figura 29 é mostrada a sequência.

Se, por exemplo, o estado correspondente ao número 14 é gerado novamente, o processo de busca começará no sítio 7. Como o estado nesse sítio corresponde a 38, o estado deve ser procurado em outro sítio. O vetor v_1 diz onde deve ser o próximo teste, neste caso é no sítio $v_1(7) = 6$. Nesse sítio está o número 22, e novamente o vetor v_1 diz onde

i	v_1	v_2	v_3		i	v_1	v_2	v_3		i	v_1	v_2	v_3
1	-1	0	0		1	-1	0	0		1	-1	0	0
2	-1	0	0		2	-1	0	0		2	-1	0	0
3	0	42	1		3	0	42	1		3	8	42	1
4	-1	0	0	$\rightarrow$	4	-1	0	0	$\rightarrow$	4	-1	0	0
5	-1	0	0		5	-1	0	0		5	-1	0	0
6	-1	0	0		6	-1	0	0		6	-1	0	0
7	-1	0	0		7	0	38	2		7	0	38	2
8	-1	0	0		8	-1	0	0		8	0	26	3

i	v_1	v_2	v_3		i	v_1	v_2	v_3
1	-1	0	0		1	-1	0	0
2	-1	0	0		2	-1	0	0
3	8	42	1		3	8	42	1
4	-1	0	0	$\rightarrow$	4	-1	0	0
5	-1	0	0		5	0	14	5
6	0	22	4		6	5	22	4
7	6	38	2		7	6	38	2
8	0	26	3		8	0	26	3

Figura 29 – Sequência que mostra o armazenamento dos dados de uma rede de tamanho $L = 6$ numa tabela de 8 sítios.

deve ser feita a próxima busca, que neste caso é $v_1(6) = 5$. O estado se encontra ali e a busca termina.

A técnica usada para calcular o segundo estado excitado do Hamiltoniano é sugerida pela equação 3.24. É necessária a multiplicação sucessiva do hamiltoniano por um vetor qualquer. Para uma rede de tamanho $L = 18$ o número de estados é 4862 cuja matriz tem aproximadamente 2.3×10^7 elementos. Mas muitos deles são zero. Portanto, o melhor é guardar a informação da matriz em dois vetores que somente contém os elementos diferentes de zero. Um dos vetores tem os valores diferentes de zero, tanto os elementos da diagonal quanto os outros. O outro vetor contém a informação dos sítios ocupados e as respectivas posições. Como exemplo ilustrativo, tomemos a matriz:

$$H_{ab} = - \begin{pmatrix} -2 & 2 & 2 & 0 & 2 \\ 1 & -3 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -3 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & -3 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -4 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.6})$$

Os vetores que representam a matriz são:

$$a = \left(\begin{array}{cccccccccccccccc} 2 & -1 & -1 & 3 & -2 & -1 & 3 & -2 & -1 & 3 & -1 & -1 & -1 & 4 & -2 & -2 \end{array} \right), \quad (\text{A.7})$$

e

$$b = \left(\begin{array}{cccccccccccccccc} 2 & 2 & 3 & 2 & 1 & 4 & 2 & 1 & 4 & 3 & 2 & 3 & 5 & 2 & 1 & 4 \end{array} \right), \quad (\text{A.8})$$

A componente $a(1)$ é a primeira diagonal de A.6, enquanto que $b(1)$ diz quantos elementos diferentes de zero tem essa coluna. Os seguintes dois elementos de a são os dois elementos fora da diagonal da primeira coluna, e os correspondentes elementos de b são suas posições na matriz.

Se precisa fazer a multiplicação entre A.6 por um vetor qualquer v , para obter um novo vetor u :

$$\left(\begin{array}{ccccc} v_1 & v_2 & v_3 & v_4 & v_5 \end{array} \right) \left(\begin{array}{ccccc} 2 & -2 & -2 & 0 & -2 \\ -1 & 3 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 3 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & -1 & 3 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 4 \end{array} \right) = \left(\begin{array}{ccccc} u_1 & u_2 & u_3 & u_4 & u_5 \end{array} \right) \quad (\text{A.9})$$

O algoritmo de multiplicação é simples. Por exemplo, $u_1 = 2v_1 - v_2 - v_3$, que se consegue a través de $a(1)$, $a(2)$ e $a(3)$; $b(1)$ nos diz até onde fazer o produto, e $b(2)$ e $b(3)$ nos dizem quais são as posições.