

Capítulo 3

Matriz de transferência

O cálculo de modelos estatísticos a partir de matrizes de transferência originou-se do tratamento exato do modelo de Ising em uma e duas dimensões. O cálculo exato do modelo de Ising na rede quadrada foi obtido por Onsager utilizando esta técnica [10].

Para utilizar esta técnica, vamos partir da equação (2.17):

$$Z = \sum_{\eta} \Gamma(\eta) \prod_i z^{\eta_i} \quad (3.1)$$

Nesta equação, o somatório é feito sobre todas as configurações do sistema, uma vez que o indicador $\Gamma(\eta)$ revela se a configuração η é permitida ou não. Explicitamente,

$$Z = \sum_{\eta_1} \sum_{\eta_2} \dots \sum_{\eta_L} \Gamma(\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_L) z^{\eta_1} z^{\eta_2} \dots z^{\eta_L} \quad (3.2)$$

onde os índices $1, 2, \dots, L$ denotam os sítios de uma cadeia. Lembramos que as regras de cada modelo impedem que todas as configurações possíveis de N partículas sejam acessíveis ao sistema no estado estacionário ativo.

Vamos supor, inicialmente, que $\Gamma(\eta)$ possa ser escrito na forma

$$\Gamma(\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_L) = \prod_i \gamma(\eta_i, \eta_{i+1}), \quad (3.3)$$

com condições periódicas de contorno, ou seja, $\eta_{L+1} = \eta_1$. Podemos então definir

uma matriz T chamada matriz de transferência, cujos elementos são definidos por:

$$T(\eta_i, \eta_{i+1}) = z^{\eta_i} \gamma(\eta_i, \eta_{i+1}) \quad (3.4)$$

A matriz de transferência obtida por esse procedimento é:

$$T = \begin{pmatrix} T(0,0) & T(0,1) \\ T(1,0) & T(1,1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma(0,0) & \gamma(0,1) \\ z\gamma(1,0) & z\gamma(1,1) \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

Assim, a somatória sobre os sítios $2, \dots, L$ na equação (3.2) torna-se o produto cíclico de L matrizes de transferência idênticas, e a somatória restante equivale a tomar o traço da matriz T^L :

$$Z = \sum_{\eta_L} T^L(\eta_L, \eta_L) = \text{Tr}(T^L) \quad (3.6)$$

Vamos supor que exista uma matriz U tal que T se torne diagonal, isto é, tal que¹:

$$UTU^{-1} = D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

Neste caso,

$$\text{Tr}T^L = \text{Tr}(D^L) = \lambda_1^L + \lambda_2^L \quad (3.8)$$

e portanto

$$Z = \lambda_1^L + \lambda_2^L \quad (3.9)$$

onde λ_i são os autovalores de T , calculados como as raízes de seu polinômio característico:

$$\det(T - \lambda I) = 0 \quad (3.10)$$

Não é necessário calcular os dois autovalores da matriz T uma vez que, para L muito grande, o maior autovalor domina o resultado. Seja λ esse maior autovalor.

¹Ressaltamos que as matrizes T que utilizamos não são de forma geral auto-adjuntas (simétricas), o que significa que a diagonalização não se dá por uma transformação unitária, isto é, U^{-1} não se identifica com sua transposta.

Ressaltamos também que as matrizes não simétricas podem não ser diagonalizáveis, o que pode ocorrer quando houver autovalores degenerados. Entretanto, para que (3.8) continue válida, basta que T possa ser triangularizada, isto é, que D seja da forma

$$D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ a & \lambda_2 \end{pmatrix}$$

Podemos reescrever (3.6) na forma:

$$Z = \lambda^L \quad (3.11)$$

A densidade é calculada, em função da atividade z , utilizando a expressão padrão da Mecânica Estatística no ensemble grande-canônico:

$$\rho(z) = \frac{z}{L} \frac{d}{dz} \ln Z \quad (3.12)$$

Levando em consideração as equações (3.11) e (3.12), obtemos:

$$\rho = z \frac{d}{dz} \ln \lambda(z) \quad (3.13)$$

Nos modelos estudados, mostrou-se mais vantajoso obter as grandezas físicas em função de λ do que em função de z , uma vez que o polinômio característico de T é um polinômio de grau n em λ (onde n é o número de linhas na matriz), o que dificulta obter λ como função de z . Sabemos entretanto que:

$$\frac{d}{dz} \lambda = \left(\frac{d}{d\lambda} z \right)^{-1} \quad (3.14)$$

Assim, em termos de λ , a densidade é calculada como:

$$\frac{1}{\rho} = \lambda \frac{d}{d\lambda} \ln z \quad (3.15)$$

onde supomos que z seja função de λ .

Vamos apresentar agora um procedimento para calcular as demais grandezas físicas. Suponhamos que desejemos calcular, para um modelo qualquer, a probabilidade de que dois sítios consecutivos estejam ocupados, que é igual a:

$$P(11) = \frac{1}{L} \left\langle \sum_{i=1}^L \eta_i \eta_{i+1} \right\rangle = \frac{1}{LZ} \sum_{\{\eta\}} \left(\sum_i \eta_i \eta_{i+1} \right) \prod_i z^{\eta_i} \gamma(\eta_i, \eta_{i+1}) \quad (3.16)$$

Para fazer este cálculo, definimos uma função de partição auxiliar $Z'(w, z)$ por:

$$Z' = \sum_{\{\eta\}} \prod_i w^{\eta_i \eta_{i+1}} z^{\eta_i} \gamma(\eta_i, \eta_{i+1}) \quad (3.17)$$

onde w é um parâmetro auxiliar.

Derivando (3.17) em relação a w , obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial w} Z' = \sum_{\{\eta\}} \left(\sum_i \frac{\eta_i \eta_{i+1}}{w} \right) \prod_i w^{\eta_i \eta_{i+1}} z^{\eta_i} \gamma(\eta_i, \eta_{i+1}) \quad (3.18)$$

Comparando (3.16) e (3.18), vemos que:

$$P(11) = \left(\frac{w}{LZ'} \frac{\partial}{\partial w} Z' \right)_{w=1} = \left(\frac{w}{\lambda'} \frac{\partial}{\partial w} \lambda' \right)_{w=1} \quad (3.19)$$

onde λ' é o maior autovalor da matriz de transferência T' cujos elementos são:

$$T'(\eta_i, \eta_{i+1}) = w^{\eta_i \eta_{i+1}} z^{\eta_i} \gamma(\eta_i, \eta_{i+1}) \quad (3.20)$$

Escrevendo T' na forma matricial, obtemos:

$$T' = \begin{pmatrix} T(0,0) & T(0,1) \\ T(1,0) & wT(1,1) \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

Vemos que esta matriz é construída a partir da matriz original, multiplicando-se a entrada relativa à sequência de sítios 11 na cadeia por uma nova variável w . A partir dessa matriz, podemos obter $\lambda'(w, z)$ igualando a zero seu polinômio característico. Invertendo esta relação funcional para obtermos $w(z, \lambda')$, podemos calcular $P(11)$ como:

$$\frac{1}{P(11)} = \lambda' \frac{\partial}{\partial \lambda'} \ln w(z, \lambda') \Big|_{\lambda'=\lambda} = \lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} \ln w(z, \lambda), \quad (3.22)$$

pois quando $w = 1$, $\lambda' = \lambda$. Na equação acima, o símbolo de derivada parcial é utilizado, porque o cálculo deve ser feito tomando-se a variável z constante. Obtendo-se $P(11)(z, \lambda)$, utilizamos as equações (3.10) e (3.15) para eliminar as variáveis z e λ e obter $P(11)(\rho)$.

As demais grandezas de dois sítios podem ser obtidas por um procedimento análogo: multiplica-se a entrada referente à sequência correspondente por uma nova variável, e a probabilidade correspondente é obtida com uma fórmula análoga à expressão (3.22).

3.1 Grandezas dependentes de três ou mais sítios consecutivos

Para calcular grandezas relativas a três ou mais sítios consecutivos, ou quando as restrições do modelo dão origem a um termo γ dependente de mais de dois sítios, não é possível utilizar a matriz de transferência definida acima. Assim, ampliamos a definição de matriz de transferência da seguinte forma:

$$T(\eta_i \eta_{i+1} \dots \eta_{i+j}, \eta_{i+1} \eta_{i+2} \dots \eta_{i+j+1}) = z^{\eta_i} \gamma(\eta_i \eta_{i+1} \dots \eta_{i+j+1}) \quad (3.23)$$

De modo geral, um termo γ dependente de n sítios dá origem a uma matriz de 2^{n-1} linhas. Assim, o tamanho da matriz de transferência aumenta exponencialmente conforme aumenta o número de sítios dos quais depende a definição do modelo. Mas, devemos notar que apenas definimos os elementos da matriz de transferência que são da forma $T(\eta_i \eta_{i+1} \dots \eta_{i+j}, \eta_{i+1} \dots \eta_{i+j} \eta_{i+j+1})$. Os demais elementos, ou seja, aqueles cujos índices de linha e coluna não estão correlacionados dessa forma, não correspondem a sequências de sítios possíveis fisicamente e devem ser nulos. Assim, embora o tamanho dessa matriz aumente exponencialmente à medida que os modelos estudados tornam-se mais complexos, as matrizes resultantes são esparsas, com uma proporção cada vez maior de elementos nulos.

Vejamus um exemplo: seja um modelo com a restrição de que não podem ocorrer sítos vacantes isolados, ou seja, $P(101) = 0$. O fator γ correspondente é definido da seguinte forma:

$$\gamma(\eta_i, \eta_{i+1}, \eta_{i+2}) = \begin{cases} 0, & \eta_i = 1 - \eta_{i+1} = \eta_{i+2} = 1 \\ 1, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (3.24)$$

Escrevendo a matriz T explicitamente, obtemos:

$$\begin{pmatrix} T(00, 00) & T(00, 01) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & T(01, 10) & T(01, 11) \\ T(10, 00) & T(10, 01) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & T(11, 10) & T(11, 11) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & z & z \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

Obtendo a maior raiz do polinômio característico dessa matriz e invertendo a relação funcional, encontramos $z(\lambda)$ e, em seguida, $\rho(\lambda)$.

As demais grandezas físicas $P(\mathbf{xx})$, onde (\mathbf{xx}) é uma seqüência qualquer, são calculadas introduzindo-se uma nova variável na matriz de transferência, a qual multiplica todos os elementos da matriz associados a uma seqüência de sítios que começa com a seqüência (\mathbf{xx}) . Por exemplo: para calcular a probabilidade de pares $P(11)$, definimos uma nova matriz T' , formada a partir de T multiplicando-se todos os elementos de T cujo primeiro índice seja igual a 11 por uma nova variável z , obtendo a matriz:

$$T' = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & wz & wz \end{pmatrix} \quad (3.26)$$

Obtemos $w(z, \lambda)$ a partir do polinômio característico de T' e calculamos $P(11)$ usando (3.22).

Para calcular a probabilidade de triplas de sítios $P(111)$, definimos uma outra matriz T'' a partir de T multiplicando o elemento $T(11, 11)$ por y , e deixando os demais intactos. Assim,

$$T'' = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & z & yz \end{pmatrix} \quad (3.27)$$

Como feito anteriormente, utilizamos o polinômio característico de T'' para calcular $y(z, \lambda)$ e obtemos $P(111)$ através de:

$$\frac{1}{P(111)} = \lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} \ln y(z, \lambda) \quad (3.28)$$

3.2 Extensão do formalismo para o caso de mais de uma grandeza conservada

Na seção anterior, vimos como escrever as grandezas físicas de um modelo em termos do autovalor λ da matriz de transferência deste modelo, no caso específico de haver uma única atividade z , relacionada à densidade de partículas do sistema por (3.13). Esta opção foi tomada porque o ensemble microcanônico original consistia de todos os estados cuja densidade assumia um valor determinado ρ , enquanto as demais grandezas variavam de acordo com a configuração.

Consideremos agora um modelo, também definido numa rede unidimensional de tamanho L , onde sítios podem estar vazios ou ocupados por uma partícula, ergódico, tal que as configurações pertencentes ao estado ativo são equiprováveis, mas com mais uma grandeza física conservada, além do número de partículas N : por exemplo, o número de pares 11, N_2 . Ou seja, as regras de transição possíveis no estado ativo deste modelo deixam N_2 constante, além de N . Como o sistema é ergódico, partindo-se de uma dada configuração $\eta(N, N_2)$, é possível alcançar as demais configurações utilizando-se as regras de transição definidas. Supondo que as regras de transição possuam a mesma taxa, para cada valor de L , N e N_2 , existe um ensemble microcanônico formado pelo conjunto de configurações microscópicas e, dado o número de configurações $W(N, N_2)$, podemos calcular as demais grandezas físicas.

Para possibilitar a execução dos cálculos, passamos desse ensemble para o ensemble grande-canônico. Definindo as atividades z e w , podemos calcular a probabilidade de uma configuração com valores de N e N_2 definidos como:

$$P(\eta) = \frac{z^N w^{N_2}}{Z(z, w)} \quad (3.29)$$

onde $Z(z, w)$, a função de partição grande-canônica, é dada por:

$$Z = \sum_{\eta} \Gamma(\eta) z^N w^{N_2} \quad (3.30)$$

onde $\Gamma(\eta)$ é o indicador do estado η . Assim, a soma acima é feita sobre todas as configurações possíveis.

Lembrando que

$$N = \sum_{i=1}^L \eta_i \quad \text{e} \quad N_2 = \sum_{i=1}^L \eta_i \eta_{i+1}, \quad (3.31)$$

se tomamos

$$\Gamma(\eta) = \prod_i \gamma(\eta_i, \eta_{i+1}, \dots, \eta_{i'}) \quad (3.32)$$

então

$$Z = \sum_{\eta} \prod_i z^{\eta_i} w^{\eta_i \eta_{i+1}} \gamma(\eta_i, \eta_{i+1}, \dots, \eta_{i'}) = \text{Tr}(T)^L = \lambda^L \quad (3.33)$$

Na expressão acima, λ é o maior dos autovalores da matriz T , cujos elementos

são definidos como:

$$T(\eta_i \dots \eta_{i'-1}, \eta_{i+1} \dots \eta_{i'}) = z^{\eta_i} w^{\eta_i \eta_{i+1}} \gamma(\eta_i, \dots \eta_{i'}) \quad (3.34)$$

Os elementos desta matriz que não são descritos acima não correspondem a configurações possíveis fisicamente, e são nulos.

Neste ensemble, as grandezas ρ e $\rho_2 = N_2/L$ flutuam, e seus valores médios são calculados como:

$$\rho(z, w) = z \frac{\partial}{\partial z} \ln \lambda(z, w) \quad (3.35)$$

$$\rho_2(z, w) = w \frac{\partial}{\partial w} \ln \lambda(z, w) \quad (3.36)$$

Invertendo as equações (3.35) e (3.36), obtemos $z(\rho, \rho_2)$ e $w(\rho, \rho_2)$, e obtemos $\lambda(\rho, \rho_2)$ substituindo estes resultados na expressão de $\lambda(z, w)$.

Para calcular grandezas $P(\text{xx})$, introduzimos uma nova variável x de modo análogo ao feito na seção 3.1. Calculando o polinômio característico da matriz transformada, obtemos $\lambda(x, z, w)$. A grandeza $P(\text{xx})$ é dada por:

$$P(\text{xx}) = x \frac{\partial}{\partial x} \ln \lambda(x, z, w) \quad (3.37)$$

Escrevendo λ , z e w em função de ρ e ρ_2 , em princípio, somos capazes de obter $P(\text{xx})$ em termos das grandezas de interesse.

Na prática, não é simples (ou mesmo possível), escrever $\lambda(z, w)$ em forma fechada, mas é possível escrever $z(\lambda, w)$ e $w(\lambda, z)$. Atendendo a esta especificidade, escrevemos versões alteradas das fórmulas (3.35) e (3.36):

$$\frac{1}{\rho} = \lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} \ln z(\lambda, w) \quad (3.38)$$

$$\frac{1}{\rho_2} = \lambda \frac{\partial}{\partial \lambda} \ln w(\lambda, z) \quad (3.39)$$

Substituindo $z(\lambda, w)$ na segunda equação acima e invertendo o sistema obtido, obtemos $w(\rho, \rho_2)$ e $\lambda(\rho, \rho_2)$. Finalmente, obtemos $z(\rho, \rho_2)$. Então, prosseguimos calculando as demais grandezas físicas.