

Processos Estocásticos de Reação e Difusão na Rede e Cadeias Quânticas

J. Ricardo G. Mendonça

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

**PROCESSOS ESTOCÁSTICOS DE REAÇÃO E
DIFUSÃO NA REDE E CADEIAS QUÂNTICAS**

JOSÉ RICARDO G. DE MENDONÇA

Banca Examinadora

Prof. Dr. Francisco C. Alcaraz (DF-UFSCar)

Prof. Dr. Vladimir Belitsky (IME-USP)

Prof. Dr. Ronald Dickman (DF-UFMG)

Prof. Dr. Salomon S. Mizrahi (DF-UFSCar)

Prof. Dr. Mário J. de Oliveira (IF-USP)

Tese apresentada como
parte dos requisitos para
obtenção do título de
Doutor em Física na área
de Física Estatística

ORIENTADOR: PROF. DR. FRANCISCO CASTILHO ALCARAZ

São Carlos, maio de 2000

**Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da
Biblioteca Comunitária/UFSCar**

M539pe

Mendonça, José Ricardo Gonçalves de.

Processos estocásticos de reação e difusão na rede e cadeias quânticas / José Ricardo Gonçalves de Mendonça. - São Carlos : UFSCar, 2012.

119 p.

Tese (Doutorado) -- Universidade Federal de São Carlos, 2000.

1. Física estatística. 2. Sistemas estocásticos. 3. Reação e difusão. 4. Markov, Processos de. 5. Álgebra linear. I. Título.

CDD: 530.13 (20^a)

Prof. Dr. Francisco Castilho Alcaraz
Presidente

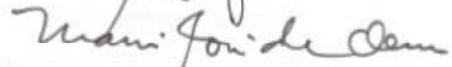
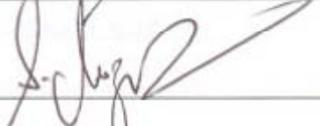
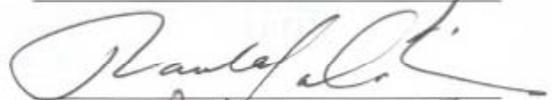
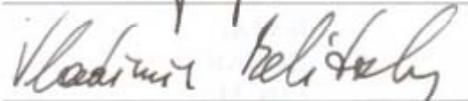
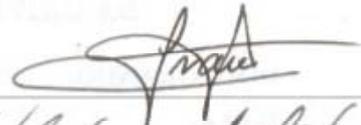
Prof. Dr. Vladimir Belitsky
Membro

Prof. Dr. Ronald Dickman
Membro

Prof. Dr. Salomon Sylvain Mizrahi
Membro

Prof. Dr. Mário J. de Oliveira
Membro

Benedito Wilson de Oliveira
Secretário do PPG-FIS



Dedico esta tese aos meus pais Mozart e Yara, em memória, e às minhas filhas Íris e Natália, vida maravilhosa.

Agradecimentos

Em primeiro lugar gostaria de agradecer aos meus irmãos José Fernando e Maria Cecília, que me apoiaram em momentos felizes e também nas horas difíceis. Parte de minha formação, talvez pequena demais, eu devo a eles.

Devo um agradecimento especial à Pedrina, minha esposa, por ter se ocupado de nossa casa, das nossas filhas, de mim, e de muitas outras coisas, permitindo assim que eu tivesse mais tempo para trabalhar e para aprender a cuidar de nós de forma cada vez mais dedicada.

Gostaria de agradecer ao Professor Francisco C. Alcaraz, por ter me aceito como aluno e por ter tentado me orientar neste doutorado. Aprendi muitas coisas com ele, mas eu desconfio que ele duvida. Gostaria também de agradecer aos Professores Antonio Lima-Santos e Nelson Studart, que demonstraram interesse em meu trabalho e me apoiaram sempre, ao Professor Márcio J. Martins, pelas conversas variadas, algumas muito instrutivas, entre muitas cascatas, e ao Professor Roland Köberle do IFSC, não sei bem porque. A eles eu devo algumas das minhas opiniões atuais sobre a ciência e sobre o mundo acadêmico, esse minifúndio.

Agradeço a todos os meus colegas e amigos do Departamento de Física pelas diversas oportunidades que tivemos de estar juntos e de conversar e de nos divertir. Entre eles estão, em ordem aleatória, o Marcelo Marchioli, o Sérgio Castro, os Wagners Utiel e Cangussu, um mais doido que o outro, o Zé Cândido, quase-primo meu, os Paulos Ramos e Noronha, a Micheline Pussycat, o Sertão, o Picininha (*sic*), o mano Pirituba, a Letícia, o Branício, o Sílvio Prado, o Carlos Destefani, vou até mesmo citar o Zé Maria Villas Boas, que nos deverá umas cervejas para sempre, o Celso Villas Boas, que não nos deve nada, o Pablo Rivera, o meu chapa Paulo Farinas, o Tuta, o Marcos Peba, o Ladir, a Amália e o Giovani, o Evandro, o Gilberto Prata-g, o Victor López, o Norton e a Livia, meus padrinhos de casamento, o Leonardo Maia, o Roberto Serra, a Márcia, o Eudes, o Bittencourt, o Sanderson, o Francesco, que tirou uma foto legal das minhas filhas, e a Tânia, o Luís Antonio do DM-UFSCar, e o Fernando F. Ferreira e a Marília Wellichan do IFSC. Agradeço também aos Professores Miled H. Y. Moussa, Paulo S. Pisani, e Gilmar E. Marques,

pelos muitos papos-furados, e aos nossos funcionários e *boys* pela assistência prestada. Sem essas pessoas, e mais algumas outras, de uma forma ou de outra teria sido mais difícil viver e trabalhar aqui.

Este trabalho contou com o financiamento do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico — CNPq, e da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo — FAPESP, agências às quais o autor agradece.

Resumo

Neste trabalho investigamos alguns processos estocásticos de reação e difusão na rede. Em particular, determinamos as classes de universalidade de comportamento crítico de um processo de crescimento de superfícies fora do equilíbrio e do processo de contato básico. Para isso utilizamos técnicas de diagonalização numérica exata e idéias de *finite-size scaling*. Também apresentamos uma aplicação do *ansatz* de Bethe na diagonalização analítica do gerador infinitesimal do processo de difusão de partículas sem exclusão conhecido como processo *zero range*.

Abstract

In this work we investigate some reaction-diffusion stochastic processes on the lattice. In particular, we determine the universality classes of critical behavior of a nonequilibrium surface growth process and of the basic contact process. Our main tools of investigation are exact numerical diagonalizations and finite-size scaling ideas. We also present an application of the Bethe *ansatz* in the exact diagonalization of the infinitesimal generator of a diffusion process of particles without exclusion known as the zero range process.

And I gave my heart to know wisdom, and to know madness and folly: I perceived that this also is vexation of spirit. For in much wisdom is much grief: and he that increaseth knowledge increaseth sorrow.

Qoheleth I.17–18, na tradução de King James

If I were a medical man, I should prescribe a holiday to any patient who considered his work important.

Bertrand Russel, *Autobiography*

Conteúdo

<i>Conteúdo</i>	xi
1 Introdução e fundamentos	1
1.1 Fundamentos	1
1.2 Da cinética química à teoria do magnetismo	6
1.2.1 Um problema em cinética química	6
1.2.2 Teoria do magnetismo	8
1.2.3 Processos estocásticos de reação e difusão na rede	10
1.3 Alguns modelos relevantes	11
1.4 Perspectivas	15
1.5 Este trabalho	18
2 Um modelo de crescimento de superfícies	19
2.1 Introdução	20
2.2 Pequena revisão das transições de enrugamento	22
2.3 O operador de evolução temporal	25
2.4 Um pouco de <i>finite-size scaling</i>	32
2.5 Comportamento crítico	34
2.5.1 O expoente crítico dinâmico	34
2.5.2 Conexão com a percolação orientada	36
2.5.3 Quebra espontânea de simetria	38
2.5.4 Um funcional energia livre fora do equilíbrio	40
2.5.5 O parâmetro de ordem de <i>string</i>	44
2.6 Conclusões e perspectivas	46

3	O processo de contato básico	49
3.1	Introdução	49
3.2	O processo de contato básico unidimensional	50
3.3	O métodos da potência	52
3.4	Expoentes críticos	55
3.5	Conclusões e perspectivas	58
4	Dinâmica de interfaces no modelo de Ising estocástico	59
4.1	Introdução	59
4.2	Descrição do modelo	61
4.3	Mapeamentos para processos de difusão	63
4.4	O <i>ansatz</i> de Bethe	67
4.4.1	Resolução do autoespectro	67
4.4.2	O expoente crítico dinâmico	71
4.5	Conclusões e perspectivas	74
5	Conclusões e perspectivas	77
5.1	Conclusões	77
5.2	Perspectivas	79
5.2.1	Processos de contato com conservação de paridade	79
5.2.2	O processo <i>zero range</i>	82
A	Métodos de projeção em subespaços de Krylov	83
B	As equações de Burgers, Kardar-Parisi-Zhang e o processo de exclusão	89
B.1	A equação de Burgers	89
B.2	A equação de Kardar-Parisi-Zhang	92
B.3	O limite hidrodinâmico do processo de exclusão assimétrico	94
	Bibliografia	97

Introdução e fundamentos

Neste capítulo fazemos algumas observações sobre o desenvolvimento da mecânica estatística fora do equilíbrio e de sua interrelação de quase um século com a teoria dos processos estocásticos [1], enfatizando o papel e a importância da equação mestra em um contexto específico da mecânica estatística fora do equilíbrio, o da cinética química. Comentamos do ponto de vista da física teórica o estado atual dessa área e algumas das linhas de pesquisa que vêm se desenvolvendo recentemente. Concluimos o capítulo com uma descrição sucinta do restante desta tese.

1.1 Fundamentos

O objetivo da mecânica estatística é explicar e prever as propriedades da matéria macroscópica a partir das propriedades de seus constituintes microscópicos e de suas interações, fornecendo a fundamentação atômica para as leis fenomenológicas da termodinâmica, da mecânica dos fluidos e de áreas correlatas.

Divide-se tradicionalmente a mecânica estatística em uma parte que trata dos fenômenos que ocorrem na matéria em estado de equilíbrio, no sentido termodinâmico usual, e outra que trata daqueles fenômenos que ocorrem na matéria fora do equilíbrio, além da divisão entre uma parte clássica e outra quântica, conforme se considere uma ou outra a dinâmica microscópica subjacente ao sistema. Podemos dizer que a Mecânica Estatística do equilíbrio é uma teoria já bem estabelecida: as propriedades de equilíbrio de sistemas macroscópicos com uma dada função hamiltoniana microscópica podem ser obtidas como valores esperados sobre *ensembles* de Gibbs (medidas de probabilidade) bem definidos, e mesmo que seu

programa seja realizável na maior parte das vezes apenas em princípio, ele fornece um ponto de partida tanto para a compreensão qualitativa quanto para aproximações quantitativas para o comportamento de equilíbrio, como nas teorias para o fenômeno das transições de fase. Além disso é possível investigar exatamente alguns modelos simples que no entanto apresentam comportamento termodinâmico complexo, o modelo de Ising bidimensional sendo o exemplo mais conhecido e versátil.

A mecânica estatística fora do equilíbrio, ao contrário, encontra-se em um estágio muito menor de compreensão, uma vez que apresenta uma quantidade de dificuldades tanto matemáticas quanto conceituais bem maiores que as encontradas na sua contraparte de equilíbrio. É fácil ver que a determinação da dependência temporal de propriedades macroscópicas associadas aos processos irreversíveis que ocorrem nesses sistemas demanda uma análise fina e detalhada da dinâmica microscópica, que acaba se traduzindo em problemas matemáticos formidáveis. No nível conceitual um dos maiores e mais antigos problemas reside em tentar conciliar e compreender a coexistência da irreversibilidade macroscópica, prevista pela segunda lei da Termodinâmica, com a completa reversibilidade microscópica das equações da dinâmica para as partículas do sistema. O fato de a evolução temporal de um gás em expansão livre e sua evolução reversa serem ambas consistentes com as leis da dinâmica mostra claramente que não é possível provar o alcance do equilíbrio em sistemas isolados sem fazer hipóteses adicionais acerca dessa evolução. Essas hipóteses são de caráter necessariamente não dinâmico, e segundo Nico van Kampen [2], “one cannot escape from this fact by any amount of mathematical funambulism”. Tipicamente essas hipóteses dizem respeito à taxa de decaimento das correlações entre muitas partículas ou à improbabilidade de realização, em uma situação experimental real, de condições iniciais que correspondam a conjuntos de medida nula no espaço de fases do sistema [3], e sempre estiveram cercadas de dificuldades técnicas e de controvérsias [4, 5].

Um esquema formal para a mecânica estatística fora do equilíbrio deve atender a alguns requisitos básicos e, principalmente, deveríamos poder deduzir sistematicamente equações de transporte, compreender o alcance do equilíbrio em sistemas isolados e estudar seus estados estacionários, além de poder observar a dependência

espaço-temporal de grandezas suficientes para uma especificação do estado macroscópico do sistema. Na tentativa de se formular uma abordagem alternativa à descrição microscópica direta dos fenômenos fora do equilíbrio baseada na equação de Liouville, muitas outras diferentes foram propostas, mas nenhuma prescrição geral válida sempre. Essas abordagens têm o seu escopo e utilidade avaliadas no confronto de suas previsões com os resultados experimentais, e verifica-se que conforme o sistema ao qual se as aplique (e podemos estar tentando descrever de uma reação bioquímica a uma atmosfera planetária) obtemos resultados mais fidedignos ou menos. Podemos classificá-las basicamente em duas categorias [6]: umas se baseiam na teoria cinética dos gases diluídos e em suas extensões para sistemas densos, seguindo a linha inaugurada por Boltzmann, enquanto outras fazem uma generalização da teoria do movimento browniano, onde a partir de equações da dinâmica de caráter mesoscópico [7] conhecidas como de Newton-Langevin se obtém, por exemplo, o formalismo das equações mestras [2, 5, 6].

A abordagem original de Boltzmann consiste em tentar derivar as propriedades fora do equilíbrio e o alcance dele através de sua equação de transporte para a função $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ de distribuição do número de moléculas num estado (\mathbf{r}, \mathbf{v}) no instante t no espaço de fases $\mu \equiv \mathbb{R}^6$ (μ para molécula), das hipóteses de *Stoßzahlansatz* [8] e de caos molecular, e de seu teorema *H*. A generalização da equação de Boltzmann para sistemas densos se faz ao considerar na descrição colisões que envolvem mais de duas partículas, isto é, colisões ternárias, quaternárias e, em última instância, colisões N -árias nas quais todas as N partículas do sistema participam. É claro que a inclusão de termos de colisão de todas as ordens corresponde à descrição microscópica do sistema, e uma descrição de caráter macroscópico se obtém pela eliminação, de alguma forma, de graus de liberdade que correspondam às suas “variáveis rápidas”, associadas a processos microscópicos com tempos de relaxação curtos em relação àqueles de observação. O formalismo dá origem a uma hierarquia de equações íntegro-diferenciais para as distribuições marginais de configuração dos estados de uma, duas, ..., N partículas, conhecida pelo nome de hierarquia BBGKY, para Bogoliubov, Born, Green, Kirkwood e Yvon. Ali podemos ver que a equação de Boltzmann é apenas a primeira da hierarquia [9].

A segunda abordagem, a das equações mestras, é provavelmente a mais importante, e sua raiz mesoscópica e browniana se baseia nas seguintes observações. A posição de um ponto γ_t representativo do sistema no espaço de fases $\Gamma \equiv \mathbb{R}^{6N}$ (Γ para gás), no instante t , é uma função suave de t e da condição inicial γ_0 nas coordenadas microscópicas. No entanto, a variação da posição de γ_t devido às colisões moleculares é tão rápida em Γ , que numa escala de observação mais grosseira, mesoscópica, ele realiza um movimento em tudo semelhante ao browniano. Na prática, implementamos essa escala de observação mesoscópica às equações de movimento macroscópicas de um observável qualquer acrescentando-lhes um termo que fie a ação de todas as muitas coordenadas que não consideramos explicitamente, e que aja introduzindo flutuações de algum caráter em torno das leis macroscópicas, transformando portanto o observável num processo estocástico. O exemplo mais conhecido de uma tal descrição é o do comportamento da velocidade de uma partícula browniana, em um processo estocástico conhecido como de Ornstein-Uhlenbeck [10].

Como não poderia deixar de ser, ao perfazermos uma eliminação de graus de liberdade microscópicos em favor de uma descrição mais grosseira estamos fazendo também hipóteses não dinâmicas acerca da evolução do sistema no tempo, e que correspondem de alguma forma à introdução da noção de observação sobre um *ensemble*. Essas hipóteses, umas aproximadamente equivalentes às outras e conhecidas pelos nomes variados de *Stoßzahlansatz*, aproximação de fases aleatórias e outros, têm o papel importante no contexto das equações mestras de justamente fazer com que os métodos da teoria do movimento browniano se apliquem ao movimento do ponto γ_t , e rendam com isso um processo estocástico markoviano para o observável em questão. Aqui, markoviano qualifica um processo para o qual a equação de Chapman-Kolmogorov vale para a função de probabilidade condicional de ocupação dos estados mesoscópicos, e consiste em supor que a distribuição de estados atuais, dada uma distribuição anterior, tem um papel exatamente equivalente ao de sua distribuição anterior no que tange a distribuição futura, e que esses papéis ao longo do processo sejam descorrelacionados, sem memória [2, 10].

Estabelecer uma relação entre a abordagem através das equações mestras, na

qual todas as hipóteses probabilísticas estão contidas na existência de um operador de evolução ou colisão mestre, e aquela abordagem microscópica através da equação de Liouville é uma questão importante que redundará em investigar se podemos construir, de alguma maneira aproximada ou média, o operador mestre, isto é, se podemos calcular termos de colisão suficientes para uma descrição mesoscópica a partir da dinâmica microscópica. Se por um lado a equação de Liouville tem a seu favor o *status* de uma equação fundamental da Física, por outro lado as equações mestras têm um grande apelo técnico. Elas são lineares na função de distribuição $P(\{n\}, t)$ para um conjunto $\{n\}$ conveniente de variáveis mesoscópicas, contêm o caráter irreversível, no sentido de uma evolução certa rumo ao equilíbrio, implementado na própria construção do operador mestre e nas hipóteses não dinâmicas ali contidas, e uma vez que se as estabeleça, podemos utilizá-las eficientemente em modelos semi-fenomenológicos. Pode-se ainda, por exemplo, provar que as soluções das equações mestras alcançam o limite desejado no tempo, isto é, que no limite de tempos infinitos as probabilidades de ocupação dos estados mesoscópicos no espaço de fases Γ alcançam a expressão correta dada pelo fator microcanônico usual. Diante destas e de outras características bastante atraentes Max Dresden declara que “it thus appears that the master equation approach allows an in principle rigorous formulation of the original Boltzmann program.” [11].

O restante deste capítulo está organizado como segue. Na próxima seção discutimos um dos problemas centrais da cinética química, que é o de estabelecer equações apropriadas para se estudar as velocidades de reação, isto é, as taxas de variação das concentrações de espécies interagentes e as limitações da abordagem tradicional, principalmente para processos que ocorrem em sistemas de baixa dimensionalidade, e a sua relação com os avanços obtidos na teoria do magnetismo. Na seção 1.3, damos exemplos de alguns dos processos estocásticos de reação e difusão na rede que vêm sendo muito investigados, uma vez que eles formam um “conjunto mínimo” de modelos na área. Finalmente, na seção 1.4 apresentamos algumas perspectivas na área, tais como novos modelos e novas técnicas matemáticas que vêm repercutindo em outras áreas da física teórica. Referências são dadas no final da tese.

1.2 Da cinética química à teoria do magnetismo

1.2.1 Um problema em cinética química

A cinética química é um dos ramos mais tradicionais e importantes da físico-química e, como seu próprio nome indica, se ocupa do estudo da cinética e da dinâmica das reações químicas. A sua importância é difícil de subestimar, uma vez que toda a indústria química não faz senão promover reações a fim de obter seus produtos, e nessa operação o estudo das velocidades das reações, de possíveis mecanismos de catálise e de outros detalhes das reações adquirem importância comercial óbvia. Além disso, toda forma de vida depende crucialmente de reações complexas, normalmente catalisadas por enzimas e em cascata, como no processo de coagulação do sangue. Pode-se portanto justificar amplamente o estudo da cinética química tanto comercialmente quanto academicamente.

A abordagem tradicional da cinética química ao estudo das reações consiste em estabelecer equações diferenciais para expressar a taxa de variação temporal das concentrações das espécies reagentes, as *rate equations*. Esta abordagem assume explicitamente que as concentrações dos reagentes são uniformes espacialmente, isto é, que as concentrações locais e globais coincidem a todo instante, e que as reações não introduzem correlações entre as diversas espécies que participam do processo. Essa uniformidade pode ser alcançada em sistemas nos quais os reagentes têm uma mobilidade muito grande, tendendo ao infinito, ou, equivalentemente, naqueles onde as probabilidades de haver reação quando do encontro dos reagentes são muito pequenas, tendendo a zero. Para sistemas sob essas condições, podemos garantir que cada partícula tem probabilidades iguais de reagir com qualquer outra partícula do sistema, e valem as *rate equations*. No caso de mobilidades pequenas ou probabilidades de reação grandes, estabelece-se um regime no qual se espera que as partículas tenham mais chances de reagir com outras próximas que com aquelas mais distantes, e nesse caso dizemos que a reação é limitada ou controlada por difusão. Sob esse regime, flutuações espaciais nas concentrações podem se desenvolver e se tornar importantes, determinando o comportamento da reação.

Podemos dizer que a abordagem através das equações para as velocidades de

reação em cinética química é análoga à aproximação de campo médio em mecânica estatística, pois, como nesta última, ignora a existência de flutuações microscópicas nas concentrações locais, e que sabemos são de suma importância, especialmente em sistemas de baixa dimensionalidade [12, 13]. De fato, para o processo $X + X \rightarrow \emptyset$, a abordagem tradicional prevê um comportamento assintótico para a concentração de X dado por $\rho_X(t) \propto t^{-1}$, enquanto em um cálculo no qual se considera as flutuações obtém-se $\rho_X(t) \propto t^{-\alpha}$, com $\alpha = \min\{1, \frac{d}{2}\}$ onde d é a dimensionalidade espacial do sistema. Observamos de passagem que para efeitos de uma teoria de escala a dimensionalidade crítica superior para esse processo é $2+1$ [13]. Dessa forma, fica evidente que um modelo para esses tipos de reações químicas deve se basear em um formalismo no qual se possa considerar flutuações, e aí as equações mestras são as candidatas naturais.

O primeiro a introduzir o conceito de reações limitadas por difusão em cinética química foi Marian von Smoluchowski [14], num trabalho em que ele considerou o processo de coagulação de colóides, uma extensão de seus interesses acerca da teoria do movimento browniano. As reações limitadas por difusão surgiram relacionadas ao fato de ele ter estudado o processo de coagulação numa fase diluída, uma solução de partículas coloidais, onde a etapa determinante da reação vem a ser o passeio browniano executado pelos reagentes até que colidam e reajam, com a reação propriamente dita correspondendo à etapa rápida do processo. Peter Debye também contribuiu para o estabelecimento desse conceito, calculando taxas de reação entre duas espécies reagentes consideradas como esferas duras, ou “esferas de influência”, através do uso de uma equação que Smoluchowski havia derivado trinta e três anos antes, ao estabelecer uma equação para a concentração de partículas brownianas evoluindo sob a ação de um campo de forças conservativo, equação que hoje é conhecida como de Smoluchowski-Fokker-Planck. Debye estava aparentemente disposto a oferecer aos químicos uma alternativa à teoria das taxas absolutas de Henry Eyring, que o incomodava com seus \hbar 's os quais, segundo ele, não deveriam ser importantes em uma reação limitada por difusão, um processo legitimamente estocástico, mesoscópico [15]. O trabalho no qual Debye se inspirou é considerado o primeiro a fazer uso de métodos estocásticos em cinética

química, creditando portanto a Smoluchowski o papel de pioneiro absoluto da área. Infelizmente Smoluchowski morreu logo após a publicação de seus trabalhos mais relevantes, em 1917, e não pode apreciar o impacto que eles tiveram no desenvolvimento subsequente da nossa compreensão da natureza dos processos estocásticos, que foi muito grande e envolveu os nomes de pesquisadores como H. Kramers, L. D. Landau, S. Chandrasekhar, M. Kac, E. W. Montroll, e muitos outros; veja [10, 15].

1.2.2 Teoria do magnetismo

Paralelamente ao desenvolvimento da teoria dos processos estocásticos, e de forma independente desta, uma grande área da física, a da teoria do magnetismo, sofreu muitos avanços e esclareceu bastante a natureza microscópica do fenômeno do magnetismo. Aos primeiros modelos baseados em conceitos clássicos e em raciocínio empírico e fenomenológico se sucederam, com o advento da mecânica quântica em sua forma praticamente definitiva na década de vinte, outros mais fundamentais, por assim dizer, baseados nas propriedades intrínsecas da matéria, os spins das partículas, e em seu comportamento coletivo. O primeiro modelo a implementar características quânticas, embora através de uma matemática ainda clássica (*c-numbers*), foi o de E. Ising em 1925 [16], que o analisou em uma dimensão e concluiu, erradamente, que ele não se prestava a uma explicação do comportamento ferromagnético em nenhuma dimensão. Ele foi corrigido onze anos depois por R. Peierls através de seu argumento de contornos, cuja versão definitiva pertence a R.B. Griffiths [17]. O primeiro modelo realmente quântico para o ferromagnetismo foi proposto em 1928 por W. Heisenberg [18], que reconheceu nas integrais de troca, que envolvem a superposição de orbitais eletrônicos, e no princípio de exclusão de Pauli a verdadeira origem do comportamento ferromagnético [19]. Logo após P. A. M. Dirac mostrou como se pode atribuir ao termo de troca um potencial efetivo que envolve a interação entre spins, agora considerados como entidades quânticas (*q-numbers*), e o modelo assim apresentado ficou conhecido como de Heisenberg. Este modelo constitui o primeiro exemplo do que viriam a se chamar depois cadeias quânticas, modelos de Heisenberg generalizados.

A fim de extrair as propriedades macroscópicas do modelo de Heisenberg, F. Bloch [20] divisou o método das ondas de spin, satisfatório a baixas temperaturas e que se mostrou um instrumento conveniente para a análise perturbativa, quando não exata, de modelos de spins quânticos em geral. Um desses modelos é o antiferromagneto de Heisenberg, no qual o sinal da integral de troca vem contrário ao do caso ferromagnético, desfavorecendo o alinhamento de spins. Em uma dimensão este modelo foi analisado por H. Bethe [21], que descobriu seu estado fundamental numa generalização do tratamento em termos de ondas de spins, o seu poderoso *ansatz* para as funções de onda do modelo, numa técnica matemática que se mostrou muito mais geral e se tornou das mais importantes no contexto dos modelos exatamente solúveis em matéria condensada e teoria quântica de campos, embora restrita a sistemas em 1+1 dimensões.

Devido à sua origem em física dos sólidos, maiores esforços foram concentrados na tentativa de se propor e resolver modelos magnéticos definidos sobre reticulados, onde resolver significa calcular algumas grandezas observáveis de tais modelos de maneira exata. Nesse sentido, a solução exata para a energia livre do modelo de Ising bidimensional por L. Onsager em 1944 [22] é certamente um dos resultados mais celebrados, e pode-se dizer que com ele surgiu uma nova frente de pesquisa em mecânica estatística, a da busca por modelos exatamente solúveis. A corrida foi grande e envolveu muitos pesquisadores, e vários modelos clássicos e quânticos se mostraram passíveis de análise exata, gerando uma grande quantidade de idéias físicas e técnicas matemáticas com implicações para toda a física teórica [23, 24].

Quanto aos processos estocásticos, no entanto, as idéias e técnicas desenvolvidas no contexto magnético aparentemente tiveram pouca penetração imediata. É claro que muitos problemas em ambas as áreas partilhavam das mesmas soluções, como no caso das funções de Green de rede para o problema do passeio aleatório e da interação entre ondas de spin, mas isso não foi suficiente para que se iniciasse uma investigação sistemática das possibilidades de aplicação dos métodos de uma teoria na outra. A situação mudou quando R. J. Glauber, em 1963, usou uma equação mestra para descrever a evolução de uma cadeia unidimensional de spins

de Ising rumo ao equilíbrio [25], introduzindo a famosa dinâmica de Glauber e inaugurando o uso de métodos estocásticos em magnetismo. Além do mais, as taxas de transição por ele escolhidas permitiam a análise exata do modelo, transformando-o num clássico. Desde então o uso de processos estocásticos e de equações mestras em teoria do magnetismo se tornou freqüente, e surgiram diversas propostas diferentes de dinâmicas microscópicas, por exemplo de mais de um spin ou mesmo de blocos inteiros de spins, ou de dinâmicas que preservam determinadas grandezas, como magnetização ou energia [26, 27].

De uma forma ou de outra todos estes métodos se baseiam em um conhecimento prévio de propriedades de equilíbrio de sistemas magnéticos clássicos para estudar uma dinâmica, em geral artificial, de um sistema de spins em torno daquelas propriedades, com a equação mestra como instrumento de investigação. A passagem do cenário magnético de spins para o de partículas interagentes ou de gás de rede é quase imediata, e assim muitos dos resultados obtidos no primeiro contexto serviram como ponto de partida para o estudo de sistemas de partículas interagentes, “moléculas”, em processos de reação e difusão.

1.2.3 Processos estocásticos de reação e difusão na rede

A conexão entre os problemas das duas grandes áreas expostas acima se dá através das matrizes de transferência de modelos clássicos d -dimensionais de equilíbrio quando estas são tomadas como operadores de evolução de um sistema $[(d-1)+1]$ -dimensional, isto é, com uma das direções espaciais originais usada como variável temporal, passada ao contínuo ou não. É claro que no estudo de processos estocásticos interessa pensar reversamente, isto é, dada uma dinâmica em um sistema de $d-1$ dimensões espaciais através das taxas de transição na equação mestra, reconhecer no operador de evolução um modelo clássico d -dimensional de equilíbrio.

Ocorre porém que houve nas últimas duas décadas um desenvolvimento muito grande na teoria de modelos clássicos bidimensionais de spins e de suas matrizes de transferência associadas, que deu origem ao estudo das cadeias quânticas [23, 24], e que possibilitou, com a abertura do horizonte dos modelos exatamente solúveis, a investigação de uma variedade cada vez maior de processos estocásticos na rede. De

fato, recentemente se percebeu que para o processo de exclusão simples simétrico com dinâmica sincrônica discreta (um autômato celular probabilístico), o operador de evolução corresponde à matriz de transferência, em uma direção diagonal, do modelo de seis vértices, um dos mais bem estudados da teoria do magnetismo [24, 28]. Da mesma forma, recentemente muitos outros processos estocásticos importantes foram investigados com o auxílio de técnicas magnéticas: o processo de exclusão simples completamente assimétrico com o auxílio do *ansatz* de Bethe [29], o processo de adsorção e dessorção de k -meros em redes d -dimensionais através do uso de técnicas de ondas de spins e argumentos de simetria [30], e também certos modelos para processos de catálise e adsorção sequencial aleatória pelo uso do formalismo de segunda quantização para variáveis fermiônicas [31, 32, 33, 34], entre outros. Para uma referência geral consulte [35].

O uso do formalismo magnético traz a possibilidade de se responder a questões importantes sobre o sistema de partículas associado. Uma dessas questões diz respeito ao comportamento da concentração de partículas no sistema, que pode rumar ao valor de equilíbrio algebricamente como $\rho(t) \propto t^{-\alpha}$, ou exponencialmente como $\rho(t) \propto e^{-t/\tau}$; uma análise do operador de evolução pode vir a prever o tipo de comportamento observado. Existe também a possibilidade de se tentar repetir no caso de fenômenos fora de equilíbrio uma teoria de transições de fases nos moldes daquela praticada para fenômenos de equilíbrio, e pela definição de expoentes críticos apropriados tentar uma classificação “universal” para tais fenômenos; este é na verdade um dos objetivos mais ambiciosos da mecânica estatística contemporânea¹.

1.3 Alguns modelos relevantes

Vamos mostrar alguns hamiltonianos magnéticos associados a processos estocásticos importantes que foram e vêm sendo estudados recentemente, sem entrar nos detalhes de sua derivação.

¹Outro objetivo aparentemente bastante ambicioso, por exemplo, é derivar a lei de Fourier para o fluxo de calor a partir de um modelo microscópico fora do equilíbrio.

Certamente, o mais simples e paradigmático de todos os processos de reação e difusão na rede é o processo de exclusão simples simétrico de uma espécie, no qual partículas difundem com iguais probabilidades em todas as direções, $X + \emptyset \rightleftharpoons \emptyset + X$. Para este processo o operador de evolução temporal (o gerador infinitesimal do semigrupo de Markov) é dado por

$$H = -\frac{D}{2} \sum_{\ell} (\vec{\sigma}_{\ell} \cdot \vec{\sigma}_{\ell+1} - 1), \quad (1.1)$$

com D a constante de difusão e $\vec{\sigma} = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$ operadores de Pauli. Uma maneira de se ver que este é realmente o operador de evolução do processo é reparar que podemos representar a difusão simétrica através do operador de permutação $P_{\ell, \ell+1} |\sigma_{\ell}, \sigma_{\ell+1}\rangle = |\sigma_{\ell+1}, \sigma_{\ell}\rangle$, e requerendo a estocasticidade da evolução, isto é, que a soma dos elementos de cada uma das colunas de H se anule para que haja conservação de probabilidades, chegamos a

$$H = -D \sum_{\ell} (P_{\ell, \ell+1} - 1). \quad (1.2)$$

Uma vez que podemos escrever $P_{\ell, \ell+1} = \frac{1}{2}(\vec{\sigma}_{\ell} \cdot \vec{\sigma}_{\ell+1} + 1)$, recobramos a expressão para H .

O operador H nada mais é que o hamiltoniano de Heisenberg ferromagnético isotrópico com a energia do estado fundamental subtraída. O espaço de autoestados deste operador se divide em $L + 1$ setores indexados pelo valor esperado da magnetização total $S^z = \sum_{\ell} \sigma_{\ell}^z$, que é uma grandeza conservada. No cenário de partículas este fato está associado à conservação do número de partículas ao longo do processo, já que $N = \frac{1}{2}(L + M)$, $M = \langle S^z \rangle$. Em cada um dos setores de H , o estado fundamental ou estacionário é composto de uma soma de todas as $L!/N!(L - N)!$ possíveis combinações de estados compatíveis com o valor de M . Como se sabe [36], o ferromagneto de Heisenberg isotrópico tem seus estados excitados dados por ondas de spin. Dado o setor de magnetização M , aplicamos ao seu estado fundamental o operador $S_q^+ = L^{-1/2} \sum_{\ell} \exp(iq\ell) \sigma_{\ell}^+$ obtendo assim um estado dito uma onda de spin de momento q , naturalmente no setor de magnetização

$M + 1$. Estas ondas de spin apresentam um espectro com as energias de excitação dadas por $E_q = D(1 - \cos q)$, que no limite termodinâmico $L \rightarrow \infty$ é um espectro sem *gap*, comportando-se para comprimentos de onda q^{-1} muito grandes como $E_q \simeq Dq^2/2$. Também se sabe que grandezas conservadas, simetrias contínuas e decaimento algébrico das funções de correlação em sistemas de partículas interagentes estão intimamente ligados. Uma simetria contínua implica em uma grandeza conservada, uma vez que o gerador dessa simetria comuta com o operador de evolução do sistema. Quando um estado fundamental quebra essa simetria, isto é, quando a despeito de a dinâmica preservar a simetria o estado fundamental não a possui, surgem no sistema modos normais com uma relação de dispersão sem *gap* conhecidos como bósons de Goldstone; veja por exemplo a exposição elementar em [37]. Assim, as ondas de spin são bósons de Goldstone, mágnons, oriundos da simetria do operador H com relação às rotações de todos os spins do sistema em torno de um eixo arbitrário na direção \hat{n} , produzida pelo operador $\vec{S} \cdot \hat{n}$, $\vec{S} = \sum_\ell \vec{\sigma}_\ell$, $[H, \vec{S}] = 0$, simetria que não é compartilhada pelo estado fundamental composto de todos os spins paralelos (no setor de $M = L$). De fato, para uma dada concentração de partículas $\rho = N/L$, obtém-se a função de autocorrelação no limite termodinâmico dada por [30]

$$G(t) = \rho(1 - \rho) \exp(-2Dt) I_0(2Dt) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} t^{-1/2}, \quad (1.3)$$

onde $I_0(z)$ é uma função de Bessel modificada, mostrando comportamento difusivo típico.

É importante reparar que o hamiltoniano de Heisenberg ferromagnético isotrópico é também, após uma transformação de similaridade envolvendo subredes, o operador de evolução do processo de adsorção e dessorção de dímeros com taxas iguais, $X + X \rightleftharpoons \emptyset + \emptyset$, e portanto as observações acima se aplicam igualmente neste caso [30]. Na verdade, os argumentos de Goldstone relativos a grandezas conservadas e comportamento algébrico das correlações podem ser aplicados ao caso mais geral de adsorção e dessorção assimétricas de k -meros, $k \geq 2$, em redes que admitem partição em k subredes tais que os processos de adsorção e dessorção envolvam sempre um sítio de cada subrede, como por exemplo ocorre com trímeros

na rede triangular, num resultado muito importante para a compreensão do comportamento difusivo observado nesses modelos [30].

Um outro processo muito estudado é a versão assimétrica da exclusão simples. Fisicamente podemos pensar na assimetria entre os processos de difusão à esquerda e à direita como resultado de um gradiente de potencial, por exemplo elétrico ou de temperaturas. O espectro do gerador deste processo, dado por

$$H(\varepsilon) = -\frac{1}{4} \sum_{\ell} [(\vec{\sigma}_{\ell} \cdot \vec{\sigma}_{\ell+1} - 1) + i\varepsilon(\vec{\sigma}_{\ell} \times \vec{\sigma}_{\ell+1}) \cdot \hat{z}], \quad (1.4)$$

com ε a assimetria relativa das taxas, foi investigado em [29] com relação a um processo de discretização do campo de velocidades da equação de Burgers unidimensional com ruído para a evolução de um fluido (veja o Apêndice B),

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \frac{\partial u(x, t)^2}{\partial x} + \nu \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial \eta(x, t)}{\partial x}, \quad (1.5)$$

onde ν é a viscosidade do fluido e $\eta(x, t)$ um ruído branco ao longo do espaço e do tempo. O operador acima contém um termo de Dzialoshinski-Moriya (DM) do tipo $(\vec{\sigma}_{\ell} \times \vec{\sigma}_{\ell+1}) \cdot \hat{z}$ bastante curioso. Os termos de DM foram primeiramente propostos como um mecanismo de competição entre acoplamentos planares e interplanares de sinais opostos em antiferromagnetos que apresentam ferromagnetismo fraco nos planos [38], e como se pode ver induzem uma orientação no espaço através do produto vetorial, quebrando a simetria quiral do sistema. No cenário de partículas interagentes isto é exatamente o que uma difusão assimétrica faz.

Em [29] os autores utilizaram o *ansatz* de Bethe na determinação dos primeiros estados excitados do operador $H(\varepsilon)$ e mostraram que o *gap* entre os estados estacionário e primeiro excitado escala com o comprimento da rede como $L^{-3/2}$, enquanto no outro extremo do espectro o *gap* entre os dois maiores autovalores escala como L^{-1} . Estas relações são importantes porque elas fornecem o expoente crítico dinâmico do modelo, revelando o comportamento assintótico do sistema no tempo de acordo com o *gap* de energia, uma vez que $\tau^{-1} \sim E \sim q^z \sim L^{-z}$, de forma que $\tau \sim L^z$. Acredita-se que as funções de correlação de dois pontos na

criticalidade (na fase sem “massa”) escalem com os comprimentos característicos do sistema como

$$G(bx, b^z t) = b^{-2y} G(x, t) = t^{-2y/z} \Phi(u), \quad (1.6)$$

com y uma dimensão de escala e na última igualdade com $u = x^z/t$ a variável de escala. Para o processo de exclusão simples completamente assimétrico ($\varepsilon = 1$) no setor de $M = L/2$, os autores em [29] encontraram $z = 3/2$, isto é, que ele pertence à mesma classe de universalidade do processo de Kardar-Parisi-Zhang [39, 40].

Os processos estocásticos que apresentamos acima foram investigados com auxílio de duas técnicas típicas da teoria do magnetismo, as ondas de spin e o *ansatz* de Bethe. A primeira destas técnicas não se restringe ao caso de sistemas unidimensionais, podendo ser utilizada com igual proveito em sistemas de qualquer dimensionalidade, ao contrário da segunda, que só funciona em uma dimensão. Para sistemas unidimensionais de dois estados existe ainda uma outra técnica que se mostrou bastante poderosa em magnetismo e que pode ser utilizada no contexto dos sistemas de partículas, a fermionização ou bosonização das relações de comutação dos operadores de Pauli. Para partículas esferas duras usa-se a fermionização, e com o operador de evolução escrito em termos de férmions interagentes pode-se lançar mão de métodos bem estabelecidos nestes casos, como por exemplo teoria de perturbação. É possível, no entanto, como nos casos acima, encontrar alguns modelos que são exatamente solúveis em termos de férmions, os chamados modelos de férmions livres, para os quais se pode diagonalizar exatamente o operador de evolução, uma forma quadrática. De fato, os modelos de férmions livres são os únicos dos quais se conhece todos os detalhes da dinâmica, como seus autoespectros e todas as funções de correlação, estas pelo menos em princípio.

1.4 Perspectivas

As perspectivas de desenvolvimento na área são muito amplas. Virtualmente qualquer novo método ou resultado em uma das duas grandes áreas, teoria do magnetismo ou de sistemas de partículas interagentes, pode ter relevância para a outra. Isto abre a perspectiva de interdisciplinaridade, e com isso uma mistura saudável

de métodos e conceitos e também de dados experimentais das duas áreas, que contam com muitos resultados teóricos e com uma vasta fenomenologia indo do estudo de sais magnéticos a biomembranas, passando pela formulação de problemas de trânsito e outros. Esses processos têm em comum o fato de serem passíveis de abordagem através de equações mestras e portanto do formalismo de cadeias quânticas.

Recentemente houve muitos avanços nas técnicas de diagonalização de operadores hamiltonianos unidimensionais, mais geralmente ditos cadeias quânticas, de origens magnéticas. Entre estas técnicas estão o *ansatz* de Bethe e os grupos quânticos, além de técnicas numéricas cada vez mais refinadas em máquinas cada vez mais velozes e disponíveis. O *ansatz* de Bethe, por exemplo, foi utilizado com sucesso no estudo do processo de exclusão simples assimétrico sob diversas condições de contorno [29, 41], e em processos em que partículas extensas de diversos tamanhos difundem e se excluem em uma dimensão [42]. Pelo lado da teoria de grupos, reconheceu-se um grande número de processos estocásticos que em cadeias abertas têm por operadores de evolução geradores de álgebras invariantes pela ação de certos grupos quânticos [43, 44, 45, 46], para as quais se conhecem vários resultados relevantes. Por exemplo, o processo de difusão assimétrica tem o operador de evolução invariante pela ação do grupo $U_q[SU(2)]$, enquanto o processo de difusão assimétrica e aniquilação de pares $X + X \rightarrow \emptyset + \emptyset$ tem o operador de evolução invariante pela ação do grupo $U_q[SU(1|1)]$ [43, 44]. O mais interessante desta formulação algébrica é que enquanto em teoria do magnetismo os grupos quânticos só aparecem pela adição de termos de fronteira ou campos externos difíceis de justificar fisicamente, nos processos de reação e difusão eles aparecem naturalmente, decorrentes das próprias taxas que definem o modelo. Mais ainda, todos os processos de reação e difusão exatamente solúveis conhecidos até o momento têm seus operadores de evolução elementos de alguma álgebra de Hecke [43, 44, 45, 46].

O processo de exclusão simples completamente assimétrico com termos de injeção e retirada de partículas nas extremidades de uma cadeia aberta é capaz de sofrer transições de fase no estado estacionário. Havendo injeção numa extremidade

com uma taxa α e retirada na outra com uma taxa β , o modelo apresenta três fases distintas no plano $\alpha\beta$: uma de altas densidades na região $\alpha > \beta$, $\beta < 1/2$, uma de densidades baixas na região $\alpha < 1/2$, $\beta > \alpha$, e uma fase de corrente máxima na região de $\alpha > 1/2$ e $\beta > 1/2$. Entre as fases de densidades altas e baixas existe a linha $\alpha = \beta \leq 1/2$ de transição de fases de primeira ordem, enquanto entre estas fases e a fase de corrente máxima há uma linha de segunda ordem. Estes resultados puderam ser obtidos exatamente utilizando uma técnica de matrizes que funciona como um *ansatz* para o estado estacionário do operador de evolução [47], numa adaptação de uma técnica previamente desenvolvida no contexto magnético [48]. Com esta técnica pôde-se calcular exatamente os perfis de densidade, as correntes e várias outras funções de correlação no estado estacionário, e assim levantar exatamente o diagrama de fases do processo. A técnica lembra uma abordagem variacional do tipo “campo médio” ou ainda estados do tipo *valence-bond solids*, utilizando porém coeficientes não comutativos, isto é, amplitudes que são *q-numbers* e que obedecem a relações de comutação dadas pelas taxas de reação.

Percebeu-se também que outros sistemas de partículas interagentes em (1+1) dimensões, apresentam fenômenos como transições de fases induzidas por defeitos ou termos de superfície [49, 50], às vezes associadas a quebra espontânea de simetria [51, 52, 53], e tem havido tentativas sérias no sentido de se compreender um pouco mais esses fenômenos [54, 55, 56].

Há ainda muito que fazer nesta área de interface entre a teoria do magnetismo e os processos estocásticos, tanto do ponto de vista puramente técnico, desenvolvendo métodos e algoritmos eficientes para determinadas classes de modelos ou tentando entender as condições matemáticas que fazem um modelo ser exatamente integrável, quanto do ponto de vista de fundamentos, tentando por exemplo entender o fenômeno da quebra espontânea de simetria ou ainda buscando classes de universalidade para transições de fase fora do equilíbrio, todos esses problemas grandemente em aberto. Uma visão panorâmica da área de mecânica estatística fora do equilíbrio junto de excelentes artigos originais e de revisão apareceu recentemente no *Brazilian Journal of Physics*, onde o leitor pode encontrar mais referências

sobre esta grande área da física contemporânea [57]. Um outro trabalho de revisão particularmente interessante para os modelos que estudamos nesta tese é [58].

1.5 Este trabalho

Nesta tese procuramos investigar alguns modelos e idéias em mecânica estatística fora do equilíbrio que surgiram nos últimos anos. Principalmente, desenvolvemos e aplicamos técnicas numéricas e analíticas de diagonalização exata e idéias de *finite-size scaling* com o objetivo de determinar a classe de universalidade dos modelos, bem como algumas de suas propriedades tanto no estado estacionário quanto dependentes do tempo.

Esta tese está organizada como segue. No Capítulo 2, examinamos a transição de enrugamento de um modelo de crescimento de superfícies fora do equilíbrio que apresenta expoentes da classe de universalidade da percolação orientada, a despeito de a transição não envolver estados absorventes. Lá investigamos também uma determinada função de correlação que surgiu no contexto de modelos de spins quânticos de equilíbrio que no entanto nos ajuda a esclarecer a natureza da transição de enrugamento do modelo. No Capítulo 3 investigamos o processo de contato básico utilizando idéias de *finite-size scaling*, e determinamos alguns expoentes críticos deste processo com alta precisão. Em particular, desenvolvemos uma técnica para o estudo de propriedades dependentes do tempo em sistemas com estados absorventes e a aplicamos na determinação do expoente crítico associado à probabilidade de sobrevivência do processo de contato básico. No Capítulo 4 fazemos uma investigação analítica, baseada no *ansatz* de Bethe, da dinâmica de uma interface no modelo de Ising bidimensional estocástico com dinâmica de Glauber no regime de baixas temperaturas. Neste capítulo mostramos como o formalismo de cadeias quânticas pode ser utilizado para calcular algumas grandezas físicas associadas à superfície de maneira bastante direta. Finalmente, no Capítulo 5 apresentamos nossas conclusões e perspectivas sobre os modelos estudados nesta tese. Os apêndices A e B contêm material de interesse para os estudos que fizemos, e complementam o material apresentado no corpo da tese.

Um modelo de crescimento de superfícies

Neste capítulo estudamos um modelo unidimensional de crescimento de superfícies fora do equilíbrio que apresenta uma transição de enrugamento na classe de universalidade da percolação orientada, transição essa associada a uma quebra espontânea de simetria. Na fase rugosa, o modelo pertence à classe de universalidade de Kardar-Parisi-Zhang. Usando idéias de *finite-size scaling* e diagonalizações numéricas determinamos o ponto crítico e o expoente crítico dinâmico no ponto de transição. Investigamos também a função de correlação de *string* e mostramos que ela é um bom parâmetro de ordem para essa classe de modelos. Apresentamos ainda uma simulação de Monte Carlo da distribuição estacionária do processo e do funcional “energia livre” associado a ela. Uma breve revisão das transições de enrugamento e das idéias de *finite-size scaling* são apresentadas, uma vez que utilizaremos estes conceitos no resto desta tese.

Este capítulo está organizado da seguinte forma. Na próxima seção introduzimos alguns dos problemas na área de sistemas de partículas interagentes que abordaremos através do estudo de um modelo de crescimento de superfícies. Na seção 2.2 fazemos uma pequena revisão sobre as transições de enrugamento, de caráter didático, enquanto na seção 2.3 apresentamos o formalismo das equações mestras assim como o utilizamos, fazemos alguns comentários sobre o seu conteúdo físico, e derivamos o operador de evolução temporal para o modelo específico que consideramos. A seção 2.4 contém uma revisão das idéias sobre transições de fases de segunda ordem e *finite-size scaling* tendo em vista o uso que fazemos delas neste trabalho. Na seção 2.5 mostramos e discutimos nossos dados para o expoente crítico dinâmico, o parâmetro de ordem da transição de enrugamento e um funcional

“energia livre” associado à distribuição estacionária do processo e o parâmetro de ordem de *string*. Finalmente, na seção 2.6 traçamos nossas conclusões e indicamos algumas direções nas quais as investigações podem ser continuadas.

2.1 Introdução

Recentemente percebeu-se que alguns sistemas de partículas interagentes podem vir a exibir fenômenos bastante interessantes em (1+1) dimensões, tais como transições de fases induzidas por defeitos ou termos de superfície [49, 50, 51]. Mais ainda, percebeu-se que muitas dessas transições de fases são acompanhadas por uma quebra espontânea de simetria (*spontaneous symmetry breaking*, SSB) [51, 59], na qual algum observável macroscópico do sistema se comporta no estado estacionário de maneira assimétrica com relação ao que seria de se esperar a partir das regras microscópicas que regem a dinâmica do processo. Fenômenos deste tipo não são usuais no contexto dos sistemas unidimensionais de partículas que interagem através de forças de curto alcance apenas, e tem havido algumas tentativas sérias no sentido de se compreender esses fenômenos, em particular o de quebra espontânea de simetria [55, 60, 61]. Aparentemente, entre os muitos ingredientes que favorecem o aparecimento de uma fase de simetria quebrada, a presença de ruído não renormalizável (*unbounded noise*) é uma componente importante, venha ele de termos de superfície ou da presença de defeitos.

Modelos de crescimento de superfícies fornecem um excelente cenário teórico para o estudo de uma grande quantidade de fenômenos, e ocorre que se pode usá-los também para investigar alguns dos fenômenos citados acima. Em um trabalho recente [52], introduziu-se uma classe de modelos de crescimento a fim de se estudar tanto a possibilidade da ocorrência de uma transição de fases lisa-rugosa em uma dimensão quanto a de uma quebra espontânea de simetria. No que tange esta última, os autores em [52] investigaram quais deveriam ser os ingredientes essenciais em um modelo para que este apresentasse quebra espontânea de simetria, e encontraram que é possível haver SSB em um modelo com condições periódicas de contorno e caracterizada por um parâmetro de ordem não conservado, em oposição ao que ocorre em modelos correlatos porém com termos de superfície bastante conspícuos

e onde a quebra de simetria está associada a um parâmetro de ordem conservado [51, 59].

Os modelos apresentados em [52] existem na versão restrita (*restricted solid-on-solid*, RSOS), na qual as diferenças de alturas entre sítios vizinhos só podem assumir os valores 0 e ± 1 , e na versão não restrita, na qual as diferenças de alturas podem assumir qualquer valor inteiro. Na versão não restrita o modelo pode ser mapeado em um problema de percolação orientada, compartilhando portanto os mesmos expoentes críticos deste processo, o que foi confirmado por simulações de Monte Carlo [52]. Para a versão restrita, no entanto, não é possível fazer o mesmo mapeamento, e permaneceu como uma conjectura o fato de o modelo pertencer também à classe de universalidade do processo de percolação orientada. É possível, no entanto, através de uma transformação do tipo sítio-ligação entre as diferenças entre as alturas de sítios vizinhos do modelo restrito e diferentes tipos de partículas em um cenário de gás de rede, chegar a um sistema equivalente de partículas de cargas opostas que difundem assimetricamente e reagem por aniquilação.

Nosso trabalho consistiu em investigar um pouco mais as versões RSOS dos modelos propostos em [52] a fim de caracterizar as suas fases e a sua classe de universalidade. Nosso estudo se baseou no mapeamento da equação mestra que rege a dinâmica do processo de reação e difusão associado ao modelo em uma equação de Schrödinger em tempo imaginário cujo hamiltoniano é o de uma cadeia quântica não hermitiana de spin $S = 1$. Isto nos permitiu aplicar técnicas de *finite-size scaling* ao processo estocástico da mesma forma que se faz com teorias de campos hamiltonianas ou com matrizes de transferência de sistemas clássicos de spins [35, 62, 63, 64], embora existam algumas diferenças tanto técnicas quanto conceituais entre os dois casos. Dessa forma fomos capazes de analisar o espectro do operador de evolução temporal para cadeias de até $L = 16$ sítios, e com isso determinar o expoente crítico dinâmico do modelo RSOS, assim como a função de correlação de *string* no estado estacionário do processo. Primeiro, no entanto, apresentamos uma pequena revisão das transições de enrugamento.

2.2 Pequena revisão das transições de enrugamento

Nesta seção apresentamos uma breve revisão das transições de enrugamento e da teoria de escalas e das classes de universalidade de comportamento crítico para esta classe de transições de fases. Seguimos as referências [65, 66] de perto.

Vamos considerar modelos de crescimento definidos sobre um substrato hiper-cúbico discreto $\Lambda \subseteq \mathbb{Z}^d$ de volume $|\Lambda| = L^d$ sítios com condições periódicas de contorno. Seja $h(\vec{x}, t)$ a função que descreve a altura associada a cada sítio $\vec{x} \in \Lambda$ no instante $t \geq 0$, isto é, seja $h(\vec{x}, t)$ o perfil instantâneo da superfície. Podemos escrever a equação que descreve o crescimento desta superfície na forma

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = G[h(\vec{x}, t), \vec{x}, t] + \eta(\vec{x}, t), \quad (2.1)$$

onde $G[h(\vec{x}, t), \vec{x}, t]$ é o termo determinístico, e $\eta(\vec{x}, t)$ é o termo de ruído, adicionado para representar o caráter aleatório dos processos de crescimento (por deposição, por exemplo) que queremos descrever. A parte determinística da eq. (2.1) despreza os termos inerciais em favor dos termos dissipativos, mas pode-se provar que no regime assintótico, estacionário, o termo inercial é irrelevante para efeitos de uma teoria de escala.

A fim de determinar a forma específica de $G[h(\vec{x}, t), \vec{x}, t]$, a abordagem tradicional consiste em expandir em série $G[h(\vec{x}, t), \vec{x}, t]$ em potências de $h(\vec{x}, t)$, \vec{x} e t , e manter na eq. (2.1) somente aqueles termos apropriados às simetrias e leis de conservação do problema. Os argumentos são os seguintes. Invariância com relação a translações espaciais ou temporais eliminam a possibilidade de $G[h(\vec{x}, t), \vec{x}, t]$ depender explicitamente de \vec{x} ou do instante específico t , de forma que devemos ter $G[h(\vec{x}, t), \vec{x}, t] = G[h(\vec{x}, t)]$ apenas. Invariância translacional ao longo da direção de crescimento elimina a possível dependência nos valores de $h(\vec{x}, t)$, uma vez que as regras de crescimento não devem depender de onde se define $h(\vec{x}_0, t_0) = 0$, e temos $G[h(\vec{x}, t)] = G[\vec{\nabla} h(\vec{x}, t)]$. Analogamente, invariância com relação a rotações e inversão em torno da direção de crescimento eliminam derivadas de ordem ímpar da expansão de $G[\vec{\nabla} h(\vec{x}, t)]$, tais como $\vec{\nabla} h(\vec{x}, t)$ ou $\vec{\nabla}^2 h(\vec{x}, t)$.

Vamos olhar agora para as leis de conservação. Podemos classificar os termos que aparecem na expansão de $G[\vec{\nabla}h(\vec{x}, t)]$ em conservativos e não conservativos. Para derivar a equação de movimento para um sistema conservativo, observamos que a parte determinística deve ter a forma de uma equação de continuidade,

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{x}, t), \quad (2.2)$$

onde a corrente macroscópica $\vec{J}(\vec{x}, t)$ que descreve o fluxo de átomos na superfície surge em geral de diferenças no potencial químico local $\mu(\vec{x}, t)$,

$$\vec{J}(\vec{x}, t) = -\vec{\nabla} \mu(\vec{x}, t). \quad (2.3)$$

A fonte mais simples de potencial químico é a energia gravitacional, $\mu(\vec{x}, t) \propto h(\vec{x}, t)$, e em 1982 Edwards e Wilkinson (EW) [67] propuseram o que é provavelmente o mais simples dos modelos estocásticos de crescimento de superfícies, dado pela equação

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = \nu \nabla^2 h(\vec{x}, t) + \eta(\vec{x}, t). \quad (2.4)$$

Na equação de EW o ruído surge devido à natureza aleatória do fluxo de partículas que atinge a superfície, sendo portanto não conservativo. O ruído também pode surgir a partir de considerações acerca das flutuações térmicas ou da difusão das partículas no substrato, sendo neste caso conservativo. A função de correlação de dois pontos para cada um dos casos é dada por

$$\langle \eta(\vec{x}, t) \eta(\vec{x}', t') \rangle = \begin{cases} 2\Gamma_0 \delta^d(\vec{x} - \vec{x}') \delta(t - t'), & \text{não conservativo,} \\ -(\Gamma_2 \nabla^2 + \Gamma_4 \nabla^4) \delta^d(\vec{x} - \vec{x}') \delta(t - t'), & \text{conservativo,} \end{cases} \quad (2.5)$$

onde os Γ_k 's são constantes. Devido a seu caráter linear, a equação de EW pode ser resolvida exatamente para ruídos gaussianos [67].

A eq. (2.4) é invariante pela inversão $h(\vec{x}, t) \rightarrow -h(\vec{x}, t)$. Esta característica é genérica em equações que não contêm termos pares em $\vec{\nabla}h(\vec{x}, t)$, tais como $(\vec{\nabla}h(\vec{x}, t))^2$. No entanto, se considerarmos um processo no qual partículas de uma fase gasosa

adsorvem em uma superfície fazendo-a crescer, não temos razão para considerar um processo com a simetria de inversão $h(\vec{x}, t) \rightarrow -h(\vec{x}, t)$. Adicionando-se o termo não linear de ordem mais baixa permitido na expansão de $G[\vec{\nabla}h(\vec{x}, t)]$, obtemos a equação de Kardar-Parisi-Zhang (KPZ) [39]

$$\frac{\partial h(\vec{x}, t)}{\partial t} = v\nabla^2 h(\vec{x}, t) + \frac{\lambda}{2}(\vec{\nabla}h(\vec{x}, t))^2 + \eta(\vec{x}, t). \quad (2.6)$$

Na equação de KPZ o mecanismo de relaxação difusional é o mesmo que na equação de EW. A origem do termo não linear reside no particular mecanismo de adsorção perpendicular das partículas na superfície, o que faz da equação de KPZ um bom modelo para o processo de deposição balística, onde as partículas podem aderir lateralmente às partículas já depositadas.

A equação de KPZ está relacionada a um grande número de problemas muito interessantes, tais como a estatística de polímeros orientados em um meio aleatório [68, 69, 70], a equação de Burgers [71], e os processos de exclusão assimétricos [72]. No Apêndice B estabelecemos com detalhes algumas dessas relações.

Podemos caracterizar o crescimento de uma superfície através de sua altura média

$$\langle h \rangle(t) = \frac{1}{L^d} \sum_{\vec{x} \in \Lambda} h(\vec{x}, t), \quad (2.7)$$

e de sua largura quadrática média ou rugosidade

$$w(L, t)^2 = \left\langle \frac{1}{L^d} \sum_{\vec{x} \in \Lambda} [h(\vec{x}, t) - \langle h \rangle(t)]^2 \right\rangle, \quad (2.8)$$

onde os parênteses retos indicam média sobre as realizações do ruído. Supondo que o processo de crescimento se inicie a partir de uma superfície completamente lisa, conforme as partículas vão se depositando a superfície vai se tornando mais rugosa, e $w(L, t)$ cresce. Em 1985, Family e Vicsek [73] propuseram, baseados em evidências numéricas, uma teoria de escala para as superfícies supondo que elas são auto-afins. De acordo com esta teoria, a rugosidade da superfície se comporta por uma transformação de escala $L \rightarrow bL$, $t \rightarrow b^z t$ de acordo com $w(bL, b^z t) = b^\alpha w(L, t)$,

que implica em

$$w(L, t) = L^\alpha \Phi(tL^{-z}). \quad (2.9)$$

Sabe-se que para $t \rightarrow \infty$ a rugosidade $w(L, t)$ satura para redes finitas, de forma que $\Phi(u \rightarrow \infty) = \text{constante}$. No entanto, para L fixo e $1 \ll t \ll L$, esperamos que as correlações nas flutuações das alturas tenham se estabelecido apenas para aquelas distâncias menores que $t^{1/z}$, de forma que $w(L, t)$ deve ser independente de L . Isto implica que $\Phi(u \ll 1) \sim u^\beta$, com $\beta = \alpha/z$. Dessa forma chegamos à conclusão que para $1 \ll t \ll L$, $w(L, t) \sim t^\beta$, enquanto para $t \gg L^z$ $w(L, t) \sim L^\alpha$. Nestas relações o expoente z é o expoente crítico dinâmico usual [74], enquanto α é conhecido como expoente de rugosidade, e caracteriza a auto-afinidade da superfície rugosa. Repare que a forma de escala (2.9) é invariante pelas transformações $\vec{x} \rightarrow b\vec{x}$, $t \rightarrow b^z t$, e $h(\vec{x}, t) \rightarrow b^\alpha h(b\vec{x}, b^z t)$, como devia ser.

Os expoentes α e z são usados para se identificar as possíveis classes de universalidade de comportamento crítico das transições de enrugamento de superfícies. Para a equação de EW em uma dimensão, estes expoentes assumem os valores $\alpha = \frac{1}{2}$ e $z = 2$. Na verdade, um simples argumento de escala revela que devemos ter em geral $\alpha = \frac{1}{2}(2 - d)$ e $z = 2$ para a equação de EW [65, 67]. Para a equação de KPZ em uma dimensão, por outro lado, $\alpha = \frac{1}{2}$ e $z = \frac{3}{2}$ ¹. Estes expoentes não podem ser obtidos por um simples reescalonamento da equação de KPZ, sendo necessário um tratamento em termos de grupo de renormalização dinâmico para obtê-los [39]. As classes de universalidade de EW e KPZ são as duas classes de universalidade de comportamento crítico conhecidas para transições de enrugamento, e aparentemente ambas são bastante robustas.

2.3 O operador de evolução temporal

Vamos nos concentrar no sistema de partículas associado ao modelo de crescimento, mais especificamente na sua matriz estocástica de transição ou matriz de intensidade. Existem várias maneiras de se escrever a equação mestra em forma operatorial, umas mais convenientes para a análise de simetrias [44], outras tendo

¹Pode-se provar que para a classe de universalidade de KPZ a relação $\alpha + z = 2$ vale sempre [65, 39].

em vista uma abordagem perturbativa [75, 76]. Aqui damos uma breve derivação para caso geral e mostramos como se pode construir o operador de dois corpos para o nosso processo usando as matrizes canônicas de Weyl, como em [44].

Vamos associar a cada sítio ℓ de uma rede unidimensional $\Lambda \subseteq \mathbb{Z}$ de volume $|\Lambda| = L$ uma variável estocástica n_ℓ tomando valores no conjunto de estados $\omega = \{0, 1, \dots, N-1\}$. Denotando por $P(\mathbf{n}, t)$ a densidade de probabilidade de realização de uma determinada configuração $\mathbf{n} = (n_1, n_2, \dots, n_\ell) \in \Omega = \omega^\Lambda$ no instante t , escrevemos a equação mestra como

$$\frac{d}{dt}P(\mathbf{n}, t) = \sum_{\tilde{\mathbf{n}} \in \Omega} [\Gamma(\mathbf{n}, \tilde{\mathbf{n}})P(\tilde{\mathbf{n}}, t) - \Gamma(\tilde{\mathbf{n}}, \mathbf{n})P(\mathbf{n}, t)], \quad (2.10)$$

na qual os $\Gamma(\tilde{\mathbf{n}}, \mathbf{n}) \geq 0$ são as taxas de transição para o processo $\mathbf{n} \rightarrow \tilde{\mathbf{n}}$.

Vamos agora introduzir espaços vetoriais na descrição da eq. (2.10). Para isso transformamos $\omega = \{0, 1, \dots, N-1\}$ em $\omega = \mathbb{C}^N$ (estritamente falando, $\omega = \mathbb{R}^N$ bastaria), e \mathbf{n} em $|\mathbf{n}\rangle = |n_1, n_2, \dots, n_L\rangle \in \Omega = \omega^{\otimes \Lambda}$. Tomando a base ortonormal $\{|\mathbf{n}\rangle\}$ diagonal na representação de número de ocupação para Ω escrevemos

$$|P(t)\rangle = \sum_{\mathbf{n} \in \Omega} P(\mathbf{n}, t)|\mathbf{n}\rangle \quad (2.11)$$

para o vetor gerador das densidades de probabilidade $P(\mathbf{n}, t) = \langle \mathbf{n} | P(t) \rangle$. Estamos dessa forma equipando o espaço das funções geratrizes com uma estrutura de espaço de Hilbert. Com este formalismo reescrevemos a eq. (2.10) como

$$\frac{d}{dt}|P(t)\rangle = -H|P(t)\rangle \quad (2.12)$$

onde H é dado por

$$H = \sum_{\tilde{\mathbf{n}}} \sum_{\mathbf{n}} H(\tilde{\mathbf{n}}, \mathbf{n})|\tilde{\mathbf{n}}\rangle\langle \mathbf{n}| \quad (2.13)$$

com $H(\tilde{\mathbf{n}}, \mathbf{n}) = -\Gamma(\tilde{\mathbf{n}}, \mathbf{n})$ e $H(\mathbf{n}, \mathbf{n}) = \sum_{\tilde{\mathbf{n}} \neq \mathbf{n}} \Gamma(\tilde{\mathbf{n}}, \mathbf{n})$. O operador H nada mais é que o gerador infinitesimal do semigrupo de Markov $U(t) = \exp(-Ht)$ do processo de Markov $\{\mathbf{n}_t, t \geq 0\}$ definido pelas taxas $\Gamma(\tilde{\mathbf{n}}, \mathbf{n})$. O espectro de H reside no semi-

plano complexo $\text{Re}\{z\} \geq 0$, e uma vez que H é um operador real, seus autovalores são reais ou ocorrem em pares complexos conjugados. O estado estacionário de H tem autovalor nulo, e para sistemas finitos ele é único, a menos de degenerescências devido a simetrias. Dizemos que a eq. (2.12) é uma equação de Schrödinger em tempo imaginário, muito embora H não tenha conotação direta de energia e em geral observe $H \neq H^\dagger$. Mesmo assim é conveniente pensar em H como um hamiltoniano cujas flutuações quânticas governam as flutuações temporais dos observáveis do sistema clássico de partículas.

Quando apenas colisões binárias intervêm no processo, escrevemos $\Gamma(\tilde{\mathbf{n}}, \mathbf{n}) = \Gamma_{c,d}^{a,b}$ para o processo elementar $(a, b) \rightarrow (c, d)$ e a eq. (2.10) fica

$$\frac{d}{dt}P(\mathbf{n}, t) = \sum_{(\ell, m) \in \Lambda} \left[\sum_{a,b=0}^{N-1} \Gamma_{n_\ell, n_m}^{n_\ell+a, n_m+b} P(n_1, \dots, n_\ell + a, \dots, n_m + b, \dots, n_L, t) - \sum_{c,d=0}^{N-1} \Gamma_{n_\ell+c, n_m+d}^{n_\ell, n_m} P(\mathbf{n}, t) \right], \quad (2.14)$$

com as adições nos índices das taxas e nos argumentos de $P(\mathbf{n}, t)$ efetuadas módulo N . Vamos subentender no que se segue condições de contorno periódicas para Λ . Podemos realizar explicitamente a álgebra dos operadores de Ω através das matrizes de Weyl (ou canônicas) $E^{p,q} = |p\rangle\langle q|$ de elementos $(E^{p,q})_{i,j} = \delta_{p,i}\delta_{q,j}$, $0 \leq p, q, i, j \leq N-1$. Um pouco de reflexão revela que com essas matrizes podemos escrever o operador H da eq. (2.13) na forma

$$H = \sum_{(\ell, m) \in \Lambda} \sum_{a,b=0}^{N-1} \sum_{c,d=0}^{N-1} \Gamma_{c,d}^{a,b} (E_\ell^{a,a} E_m^{b,b} - E_\ell^{c,a} E_m^{d,b}), \quad (2.15)$$

onde $E_\ell^{p,q} = \mathbf{1} \otimes \dots \otimes \mathbf{1} \otimes E^{p,q} \otimes \mathbf{1} \otimes \dots \otimes \mathbf{1}$, com $\mathbf{1}$ a matriz unitária $N \times N$, e com $E^{p,q}$ ocupando a ℓ -ésima posição no produto direto. Da eq. (2.15) vemos que H é uma matriz $N^L \times N^L$, em geral não simétrica e muito esparsa.

O processo no qual estamos interessados é um modelo para crescimento de superfícies como segue [52]. Seja $h_\ell \in \mathbb{N}$ a altura de uma superfície ou interface

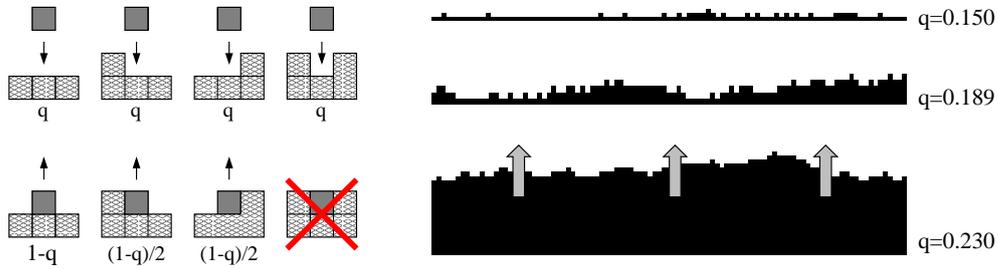


Figura 2.1: Modelo de crescimento de superfícies RSOS. À esquerda vemos os processos e taxas que definem o modelo; repare que não há dessorção de monômeros a partir de terraços completos. À direita vemos uma ilustração da transição de enrugamento: para $q > q^* \simeq 0.189$ a superfície se move e cresce, enquanto para valores de $q < q^*$ a superfície não avança e permanece lisa, em uma fase desordenada com estrutura de fluido antiferromagnético de spins.

apoiada sobre o sítio $\ell \in \Lambda$. A superfície evolui sequencialmente no tempo pela tentativa, em um sítio escolhido aleatoriamente, de adsorção de uma partícula $h_\ell \rightarrow h_\ell + 1$ com probabilidade qdt , e dessorção de uma partícula $h_\ell \rightarrow \min\{h_{\ell-1}, h_\ell\}$ ou $h_\ell \rightarrow \min\{h_\ell, h_{\ell+1}\}$ cada qual com probabilidade $\frac{1}{2}(1-q)dt$. Impomos agora a condição de RSOS $|h_{\ell+1} - h_\ell| \leq 1$, para todo $\ell \in \Lambda$, que sugere o uso de variáveis de ligação $c_\ell = h_{\ell+1} - h_\ell \in \{-1, 0, 1\}$; veja as Figuras 2.1 e 2.2. A fim de não sobrecarregar a notação com sinais de mais e de menos desnecessários, vamos tomar os valores de c_ℓ módulo 3, mapeando $c_\ell = -1, 0, 1$ em $c_\ell = 2, 0, 1$, respectivamente. Nesta representação o processo de crescimento pode ser descrito pelas taxas de transição

$$\begin{aligned}
 \Gamma_{01}^{10} &= \frac{1}{2}(1-q), & \Gamma_{10}^{01} &= q, \\
 \Gamma_{02}^{20} &= q, & \Gamma_{20}^{02} &= \frac{1}{2}(1-q), \\
 \Gamma_{00}^{12} &= 1-q, & \Gamma_{00}^{21} &= q, \\
 & & \text{e} & \Gamma_{12}^{00} &= q.
 \end{aligned} \tag{2.16}$$

De acordo com a eq. (2.12), escrevemos para este processo o operador de evolução

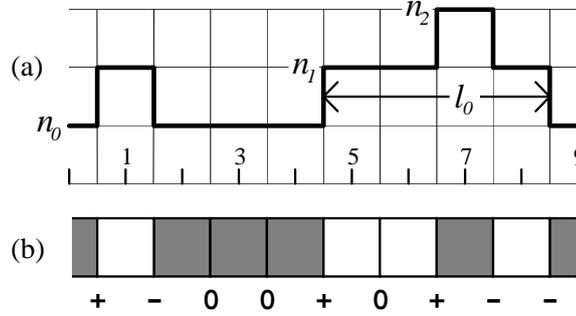


Figura 2.2: Mapeamento entre a superfície e o conjunto de cargas interagentes.

temporal como

$$H = \sum_{\ell=1}^L H_{\ell,\ell+1} \quad (2.17)$$

com a matriz de transição de dois corpos dada explicitamente por

$$H_{\ell,\ell+1} = \begin{pmatrix} q & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & -q & \cdot & -(1-q) & \cdot \\ \cdot & \frac{1}{2}(1-q) & \cdot & -q & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & q & \cdot & \cdot & \cdot & -\frac{1}{2}(1-q) & \cdot & \cdot \\ \cdot & -\frac{1}{2}(1-q) & \cdot & q & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & q & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & -q & \cdot & \cdot & \cdot & \frac{1}{2}(1-q) & \cdot & \cdot \\ -q & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 1-q & \cdot \\ \cdot & \cdot \end{pmatrix}, \quad (2.18)$$

onde ordenamos os vetores da base de dois sítios antilexicograficamente, isto é, tomamos a ordem $|0,0\rangle < |1,0\rangle < \dots < |1,2\rangle < |2,2\rangle$, e os pontos indicam elementos nulos.

No modelo definido pelas Eqs. (2.16), quando a taxa de adsorção é pequena, dessorção a partir das “quinas” de regiões rugosas junto da ausência de dessorção a partir de terraços lisos fornecem mecanismos locais que eliminam ilhas da fase

minoritária, estabilizando portanto a fase lisa a despeito da ergodicidade do modelo. Regras locais que dissolvem ilhas de uma fase minoritária têm sido procuradas há muito tempo por cientistas teóricos da computação, uma vez que elas permitem a construção de dispositivos de cálculo e armazenamento confiáveis utilizando apenas mecanismos locais de correção de erros [60, 61]. Elas também são de algum interesse a biólogos teóricos que investigam a possibilidade de auto-organização na presença de ruído “hostil” [61]. De um ponto de vista mais fundamental, um aspecto importante deste tipo de regras é que elas fornecem contra-exemplos à chamada conjectura das probabilidades positivas, que diz que se todas as probabilidades de transição locais são positivas então um meio unidimensional é ergódico [77]. O primeiro contra-exemplo a esta conjectura apareceu no modelo do votante anisotrópico de A.L. Toom [54], que desde então tem tido um papel importante no desenvolvimento do assunto [55, 78].

Antes de passar à análise do operador H , convém mencionar algumas de suas propriedades gerais. Sendo uma matriz estocástica de transição, conservação do fluxo de probabilidades requer que a soma dos elementos de cada uma de suas colunas se anule, de forma que

$$\sum_i H_{ij} = 0, \quad H_{jj} = - \sum_{i \neq j} H_{ij}. \quad (2.19)$$

A primeira dessas propriedades implica na existência de um autovetor trivial à esquerda de autovalor zero,

$$|\Omega\rangle = \sum_{\mathbf{n} \in \Omega} |\mathbf{n}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}^{\otimes \Lambda}, \quad \langle \Omega | H = 0, \quad (2.20)$$

com $\langle \Omega | \Omega \rangle = |\Omega| = N^L$ o volume do espaço de estados. Este vetor especial tem um papel importante no cálculo de valores esperados, pois podemos escrever a média de um observável $O(\mathbf{n})$ do sistema com relação às densidades de probabilidade $P(\mathbf{n}, t)$

como

$$\langle O \rangle(t) = \sum_{\mathbf{n} \in \Omega} O(\mathbf{n})P(\mathbf{n}, t) = \langle \Omega | O | P(t) \rangle. \quad (2.21)$$

Esperamos que observáveis físicos do sistema clássico de partículas sejam diagonais na base natural $\{|\mathbf{n}\rangle\}$, já que devem todos comutar entre si. H obviamente não é diagonal nesta base, pois não é um observável do sistema. A eq. (2.21) expressa uma diferença importante entre a física quântica e o tipo de física clássica que temos aqui: é a de que os valores esperados dos observáveis são lineares em $|P(t)\rangle$, e não bilineares, os elementos de $|P(t)\rangle$ sendo densidades de probabilidade elas próprias, e não amplitudes de probabilidade.

Além dessas propriedades gerais, comuns a todas as matrizes estocásticas de transição, a matriz H na eq. (2.17) é invariante translacional, devido às taxas homogêneas em uma geometria periódica, e possui uma simetria $U(1)$ indexada pela diferença $Q = Q^{(+)} - Q^{(-)}$ entre os números de partículas do tipo “+” e do tipo “-” que participam do processo e que é uma grandeza conservada, veja as Eqs. (2.16). Estas simetrias permitem-nos bloco-diagonalizar H e escrevê-la como a soma direta

$$H = \sum_{Q=-L}^L \sum_{k=0}^{L-1} H_k^Q, \quad (2.22)$$

na qual Q e k rotulam os setores de carga $U(1)$ e de momento, respectivamente. Cada setor de carga $U(1)$ representa uma classe fechada do processo estocástico, com a correspondente matriz bloco H^Q sendo ela própria uma matriz estocástica de transição regendo a dinâmica dentro do setor dado. Dizemos neste caso que o processo é decomponível, não ergódico, e que o índice Q de carga $U(1)$ classifica suas $2L + 1$ classes fechadas, irreduzíveis. A decomposição em setores de momento, no entanto, foi feita puramente por conveniência numérica, uma vez que ela reduz a ordem das matrizes de $\sim 1/L$, sendo que o setor de momento fisicamente relevante é o de momento nulo $k = 0$, já que é neste setor que está o estado estacionário do sistema, de autovalor zero, e também a superfície completamente lisa do modelo (no setor de carga $Q = 0$). É claro que poderíamos procurar por uma relação da forma $E(k) \sim k^z$ entre os autovalores de H e os momentos, mas não esperamos

ser capazes de extrair informações relevantes a partir desta relação, por exemplo acerca do valor de z , para redes pequenas. Além do mais, a interpretação de uma tal relação para as excitações elementares do processo estocástico como uma relação de dispersão para quasi-partículas de uma teoria de campos livres seria um pouco temerária, veja [79, 80].

2.4 Um pouco de *finite-size scaling*

Os conceitos de *finite-size scaling* surgiram no contexto da mecânica estatística de equilíbrio como uma maneira de se inferir as propriedades dos sistemas no limite termodinâmico, de volume infinito, a partir das propriedades observadas em sistemas finitos [35, 62, 63, 64]. A principal observação por trás destes conceitos é a de que próximo a um ponto de transição de fases, as componentes microscópicas de sistema se comportam coletivamente em escalas de comprimento ξ macroscópicas. (A grandeza ξ está associada ao decaimento da função de correlação de dois pontos $G(\mathbf{r})$ através de $G(\mathbf{r}) \propto \exp(-r/\xi)$). No limite termodinâmico, ξ diverge algebricamente (preservando assim a invariância de escala), o que define o expoente crítico ν através de $\xi \propto (q - q^*)^{-\nu}$. Junto do expoente β associado ao parâmetro de ordem $m \propto (q - q^*)^\beta$ quando $q \downarrow q^*$ (que é nulo na fase desordenada, de “altas temperaturas”, e diferente de zero na fase ordenada, de “baixas temperaturas”), podemos classificar as transições de fase de segunda ordem (ou superior) de sistemas em equilíbrio em classes de universalidade de comportamento crítico indexadas pelos valores de ν e β . Em sistemas finitos, ξ não pode divergir, uma vez que não pode se tornar maior que o tamanho característico L do sistema. Ele é, no entanto, uma função crescente de L quando nos aproximamos de um ponto crítico, e esperamos encontrar $\xi_L \propto L^{\nu_L}$ para algum expoente ν_L . Idealmente, investigando as propriedades de ξ_L para valores diferentes de L podemos inferir o verdadeiro comportamento crítico do sistema. As idéias de *finite-size scaling* foram exploradas à exaustão e se mostraram muito frutíferas, principalmente quando aliadas a estudos numéricos, sendo atualmente muito bem fundamentadas, inclusive matematicamente.

Em mecânica estatística fora do equilíbrio, temos a introdução do tempo como uma dimensão adicional do problema. Em princípio nada nos autoriza a considerar

as dimensões espaciais e a dimensão temporal equivalentes, e a fim de aplicar as idéias de *finite-size scaling* a problemas fora do equilíbrio devemos distinguir comprimentos de correlação espaciais, usualmente denotados por ξ_{\perp} , do comprimento de correlação temporal ξ_{\parallel} . Próximo a um ponto de transição de fases contínua, esperamos que estes comprimentos de correlação divirjam como $\xi_{\perp} \propto (q - q^*)^{-\nu_{\perp}}$ e $\xi_{\parallel} \propto (q - q^*)^{-\nu_{\parallel}}$, onde os expoentes ν_{\perp} e ν_{\parallel} caracterizam os graus de divergência em cada uma das dimensões. Podemos relacionar estes dois expoentes dizendo que

$$\xi_{\parallel} \propto \xi_{\perp}^z \propto |q - q^*|^{-\nu_{\parallel}} \propto |q - q^*|^{-z\nu_{\perp}}, \quad (2.23)$$

de forma que $z = \nu_{\parallel}/\nu_{\perp}$ mede de alguma forma o grau de anisotropia entre as dimensões espaciais e a dimensão temporal. Este expoente é conhecido como expoente crítico dinâmico, e é ele que usualmente se calcula em problemas de mecânica estatística fora do equilíbrio, devido à sua importância para se entender os tempos de relaxação dos sistemas (o que tem importância, por exemplo, ao se fazer simulações de Monte Carlo). Novamente, junto do expoente associado ao parâmetro de ordem do problema, podemos classificar as transições de fase em sistemas fora do equilíbrio em classes de universalidade de comportamento crítico indexadas pelos valores de ν_{\perp} , ν_{\parallel} (ou z) e β .

Em um sistema finito de tamanho característico L fora do equilíbrio, a hipótese de *finite-size scaling* toma a forma

$$\xi_{\parallel,L}^{-1} = L^{-z_L} \Phi(|q - q_L^*| L^{1/\nu_{\perp,L}}), \quad (2.24)$$

onde z_L e $\nu_{\perp,L}$ são as versões finitas de z e ν_{\perp} , e $\Phi(u)$ é uma função de escala que se comporta para valores grandes de u como $\Phi(u \gg 1) \sim u^{\nu_{\parallel}}$. Esperamos que no limite termodinâmico $\lim_{L \rightarrow \infty} q_L^*, z_L, \nu_{\perp,L} = q^*, z, \nu_{\perp}$. Das Eqs. (2.23) e (2.24) obtemos

$$\frac{\ln \left[\xi_{\parallel,L}(q_L^*) / \xi_{\parallel,L'}(q_{L'}^*) \right]}{\ln(L/L')} = \frac{\ln \left[\xi_{\parallel,L''}(q_{L''}^*) / \xi_{\parallel,L}(q_L^*) \right]}{\ln(L''/L)} = z_L, \quad (2.25)$$

que através da comparação de sistemas de três tamanhos diferentes $L' < L < L''$ fornece simultaneamente os valores de q_L^* e z_L . Mais ainda, de acordo com a

hipótese de escala (2.24), podemos obter o expoente $\nu_{\perp,L}$ como $\nu_{\perp,L}^{-1} = z_L + \frac{1}{2}(\zeta_{L',L} + \zeta_{L,L'})$, onde

$$\zeta_{M,N} = \frac{\ln \left[\left(\frac{\partial \xi_{\parallel,N}^{-1}}{\partial \lambda} \right) / \left(\frac{\partial \xi_{\parallel,M}^{-1}}{\partial \lambda} \right) \right]}{\ln(N/M)}, \quad (2.26)$$

com as derivadas calculadas em $q = q_L^*$.

Na eq. (2.24), escolhemos expressar a hipótese de escala em termos do comprimento de correlação temporal $\xi_{\parallel,L}$ porque assim como em um sistema finito a única escala de comprimento presente é o comprimento característico L , a única escala de tempo presente é aquela associada ao *gap* $E_L^{(1)} - E_L^{(0)} = E_L^{(1)}$ do operador de evolução temporal H do sistema, e esta é uma grandeza “facilmente” calculável. É claro que este *gap* e $\xi_{\parallel,L}$ estão relacionados por $\xi_{\parallel,L}^{-1} = \text{Re}\{E_L^{(1)}\}$. Toda nossa abordagem de *finite-size scaling* se baseou neste princípio.

2.5 Comportamento crítico

2.5.1 O expoente crítico dinâmico

Calculamos os *gaps* ΔE_L usando o algoritmo de Arnoldi [81, 82]. Este algoritmo é um método de projeção em subespaços de Krylov que efetua a redução de uma matriz complexa não simétrica genérica a uma matriz de Hessenberg superior cujos autopares (autovalores e respectivos autovetores) convergem variacionalmente para aqueles da matriz original, com as partes mais externas do autoespectro convergindo primeiro (veja o Apêndice A). A fim de economizar memória usamos uma versão *restarted* do algoritmo, na qual fixamos o tamanho do subespaço de Krylov e usamos alguns dos autovetores obtidos numa iteração do algoritmo, de preferência aqueles mais próximos dos que estamos procurando, como vetores iniciais para a próxima iteração, até que tenhamos obtido a precisão desejada nos autopares que convergiram. Desta forma fomos capazes de lidar com matrizes de ordens até 324 862 (a dimensão do espaço de Hilbert no setor $Q = 0$, $k = 0$ para uma rede de $L = 16$ sítios), mantendo o subespaço de Krylov sempre com menos de 64 vetores. Os cálculos foram feitos em um computador Digital Alpha Server 8200-5/300 com 1 Gb de memória RAM e rodando a 300 MHz; o maior caso levou ~ 45 minutos

e 195 Mb para gerar a matriz e calcular alguns de seus primeiros autovalores com uma precisão de 10^{-14} , necessitando de 6 a 15 *restarts* para convergir.

Os resultados obtidos a partir das Eqs. (2.25) estão sumarizados nas Tabelas 2.1 e 2.2. Os valores extrapolados na última linha das tabelas foram obtidos pelo algoritmo de Bulirsch-Stoer [83], com o valor do parâmetro ω_{BST} escolhido para minimizar as diferenças entre os elementos da penúltima entrada nas tábuas de extrapolação.

Os dados destas tabelas em princípio nos surpreenderam, pois eles mostram dois conjuntos de valores aparentemente convergentes para pontos distintos do espaço de parâmetros. Ao aplicarmos as Eqs. (2.25) para obter os valores de q_L^* e z_L , encontramos duas regiões para as quais esses valores apresentavam, de alguma forma, comportamento regular. Em uma delas observamos que a igualdade entre as duas primeiras expressões da eq. (2.25) não era exata, mas que mesmo assim havia um ponto de máxima aproximação (mínima diferença entre as duas fórmulas) em que os valores de q_L^* e z_L pareciam se comportar bem. Estes dados estão mostrados na Tabela 2.1. Também encontramos uma região no espaço de parâmetros em que a igualdade se realizava exatamente, e estes dados estão mostrados na Tabela 2.2. O comportamento destes dois conjuntos de dados pode ser visto na Figura 2.3.

O primeiro conjunto de dados, Tabela 2.1, mostrou uma convergência bastante suave tanto para $q^{*'}$ quanto para z' , enquanto o segundo conjunto de valores mostrou um comportamento bem mais irregular. Os valores na Tabela 2.1 indicam que o expoente crítico dinâmico do processo converge para $z \simeq 1.585$, compatível com o expoente crítico dinâmico da percolação orientada, cujo melhor valor conhecido atualmente é $z_{\text{DP}} = 1.580745(10)$ [84], e que o ponto de transição de fases de segunda ordem está localizado em $q^{*'} \simeq 0.1875$. Já os valores da Tabela 2.2 parecem indicar que o ponto de transição de fases $q^{*''}$ obtidos é robusto, e acreditamos que se tivéssemos tido acesso a tamanhos de rede maiores, teríamos observado $q^{*''} \rightarrow q^{*'}$. O caso do expoente crítico dinâmico é diferente: ele parece convergir para um valor completamente distinto de z_{DP} . Na verdade, esperávamos por isso, pois de acordo com a Ref. [52], na fase rugosa o modelo apresenta os expoentes dos modelos de Kardar-Parisi-Zhang [39], em particular $z_{\text{KPZ}} = \frac{3}{2}$. Como se pode ver da Tabela 2.2,

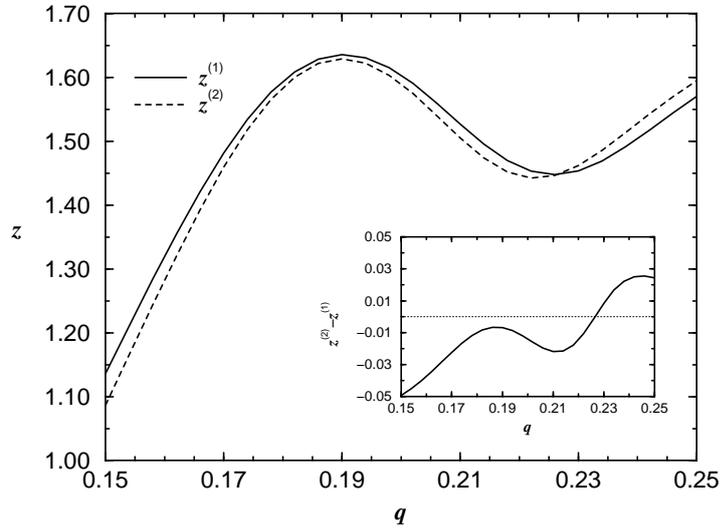


Figura 2.3: Variação do expoente z com q . Os valores de $z^{(1)}$ e $z^{(2)}$ foram obtidos a partir da primeira e da segunda igualdades na eq. (2.25), respectivamente, usando $L', L, L'' = 13, 14, 15$. A figura menor mostra que a diferença entre os valores de $z^{(1)}$ e $z^{(2)}$ alcança um mínimo próximo de $q = 0.188$, e se anula próximo a $q = 0.226$.

no começo da sequência de dados finitos z_L'' parece estar convergindo para z_{KPZ} , mas logo depois os valores se degradam bastante, apresentando inclusive uma não monotonicidade pouco usual. Ainda assim, podemos tomar o conjunto de valores de z_L'' na Tabela 2.2 como indicando a presença de toda uma fase crítica com um expoente diferente de z_{DP} , provavelmente com $z'' = z_{KPZ}$.

2.5.2 Conexão com a percolação orientada

Podemos entender o surgimento do expoente crítico dinâmico da classe da percolação orientada no modelo que estamos investigando da seguinte forma. Considerando os sítios com $h_\ell = 0$ como partículas X , crescimento segundo o processo $h_\ell \rightarrow h_\ell + 1$ corresponde a uma aniquilação espontânea $X \rightarrow \emptyset$. Analogamente, dessorção $h_\ell \rightarrow \min\{h_\ell, h_{\ell+1}\}$ pode ser considerada como um processo de criação, mas uma vez que a dessorção só ocorre a partir das “quinas” dos terraços, este processo de criação necessita da presença de uma outra partícula para ocorrer, e temos um processo do

Tabela 2.1: Dados de tamanho finito para a região onde observamos apenas uma aproximação máxima entre as duas primeiras expressões na eq. (2.25). Os números entre parênteses representam o erro estimado para o último dígito de cada dado.

L', L, L''	q_L^*	z_L'
5,6,7	0.190 461(1)	1.794 411(1)
6,7,8	0.190 676(1)	1.749 008(1)
7,8,9	0.189 988(1)	1.718 350(1)
8,9,10	0.189 294(1)	1.695 320(1)
9,10,11	0.188 753(1)	1.677 170(1)
10,11,12	0.188 355(1)	1.662 589(1)
11,12,13	0.188 076(1)	1.650 766(1)
12,13,14	0.187 885(1)	1.641 112(1)
13,14,15	0.187 761(1)	1.633 190(2)
14,15,16	0.187 683(1)	1.626 655(2)
Extrapolado	0.187 52(3)	1.585 3(2)
$[\omega_{\text{BST}}]$	$[7.329]$	$[2.543]$

tipo $X\emptyset, \emptyset X \rightarrow XX$. Este processos lembram as regras que definem o processo da percolação orientada. Mais especificamente, a conexão com a percolação orientada pode ser estabelecida exatamente no caso do processo sem a restrição RSOS. No modelo irrestrito, a dinâmica da primeira camada se desacopla da dinâmica do resto da superfície, e introduzindo as variáveis $n_\ell = \delta_{h_\ell, 0}$ reescrevemos as regras de crescimento como

$$\begin{aligned}
 n_\ell = 1 & \xrightarrow{q} n_\ell = 0 \\
 (n_{\ell-1}, n_\ell, n_{\ell+1}) = (0, 0, 1) & \xrightarrow{\frac{1}{2}(1-q)} (n_{\ell-1}, n_\ell, n_{\ell+1}) = (0, 1, 1) \\
 (n_{\ell-1}, n_\ell, n_{\ell+1}) = (1, 0, 0) & \xrightarrow{\frac{1}{2}(1-q)} (n_{\ell-1}, n_\ell, n_{\ell+1}) = (1, 1, 0) \\
 (n_{\ell-1}, n_\ell, n_{\ell+1}) = (1, 0, 1) & \xrightarrow{1-q} (n_{\ell-1}, n_\ell, n_{\ell+1}) = (1, 1, 1).
 \end{aligned}$$

Estas regras para as variáveis n_ℓ nada mais são que as regras para o processo de contato básico (veja o Capítulo 3), segundo as quais uma partícula $n_\ell = 1$ se aniquila a uma taxa unitária, e uma partícula é criada em um buraco $n_\ell = 0$ a uma taxa

Tabela 2.2: Dados de tamanho finito para a região onde observamos cruzamento de níveis, isto é, igualdade entre as duas primeiras expressões na eq. (2.25). Acreditamos que os dados sem uma incerteza associada são exatos até as casas mostradas.

L', L, L''	$q_L^{*''}$	z_L''
5,6,7	0.295 749	1.445 967
6,7,8	0.275 660	1.458 235
7,8,9	0.261 781	1.463 535
8,9,10	0.251 648	1.464 937
9,10,11	0.244 053	1.463 830
10,11,12	0.238 186	1.461 059
11,12,13	0.233 511	1.457 203
12,13,14	0.229 689	1.452 672
13,14,15	0.226 497	1.447 753
14,15,16	0.223 784	1.442 647
Extrapolado [ω_{BST}]	0.193 204(1) [1.815]	1.414(7) [7.345]

$\lambda = (1 - q)/2q$ por partícula vizinha.

A transição de percolação está na origem da transição de enrugamento para o processo de crescimento irrestrito. Na fase ativa da percolação orientada, a interface flutua próxima à camada inferior, de forma que neste caso a superfície permanece lisa. Já na fase inativa da percolação orientada, a interface começa a se mover. A velocidade de crescimento da interface para $q > q^*$ é portanto proporcional ao tempo característico de sobrevivência de um processo de percolação orientada na fase inativa, $v \propto \xi_{\parallel}^{-1} \propto (q - q^*)^{1/\nu_{\parallel}}$. Estes argumentos foram originalmente apresentados e verificados em [52].

2.5.3 Quebra espontânea de simetria

Uma vez que a superfície sofre uma transição entre uma fase lisa e outra rugosa, é natural pensar em um parâmetro de ordem que revele essa transição. Seria ainda interessante trabalhar com um parâmetro de ordem que levasse em consideração

as simetrias do processo, que são, além das simetrias translacional e $U(1)$, uma simetria Z_∞ devido ao fato de a dinâmica microscópica ser invariante por uma translação arbitrária nas alturas. Um parâmetro de ordem apropriado é dado por [52]

$$M_L = \frac{1}{L} \sum_{\ell=1}^L (-1)^{h_\ell}, \quad (2.27)$$

que é uma grandeza “rápida”, na medida em que não é conservada pela dinâmica. A escolha deste parâmetro de ordem antecipa a interpretação da transição de enrugamento (na verdade, da transição de alisamento) como resultado de uma quebra espontânea da simetria Z_∞ : enquanto na fase rugosa todas as alturas são igualmente prováveis, na fase lisa o sistema seleciona um nível fiducial em torno do qual a superfície apenas flutuará, sem se mover como um todo. Portanto, espera-se que no limite termodinâmico $M = \lim_{L \rightarrow \infty} M_L$ seja finito na fase lisa e nulo na fase rugosa, devido às flutuações que ali ocorrem.

Calculamos o valor do parâmetro de ordem M_L para valores pares de L entre $L = 8$ e $L = 16$, e os nossos dados de tamanho finito junto das extrapolações aparecem na Figura 2.4. Desta figura podemos ver claramente que a transição ocorre em torno de $q = 0.190$, embora a localização precisa do ponto crítico não seja possível a partir desta figura. Não encontramos nenhum sinal de dois valores críticos q^* , conforme se poderia supor dos dados para os expoentes críticos, uma indicação de que realmente devemos ter $q^{*''} \rightarrow q^{*'}$ quando $L \rightarrow \infty$.

O parâmetro de ordem M_L se anula para valores de $q \lesssim q^*$ como $M = \lim_{L \rightarrow \infty} M_L \propto (q^* - q)^\eta$. Um gráfico de $\ln M_L \times \ln(q^* - q)$ para os pontos $0.12 \leq q \leq 0.18$ da curva extrapolada da Figura 2.4 junto de uma regressão linear aparecem na Figura 2.5. Encontramos um expoente $\eta = 0.57 \pm 0.03$, de acordo com valores previamente encontrados na literatura para este modelo e em modelos correlatos: no primeiro dos trabalhos em [52], foi encontrado um valor $\eta = 0.55 \pm 0.05$, enquanto em uma simulação de um modelo de crescimento de colônias de fungos em agarose (com dinâmica paralela) encontrou-se $\eta \simeq 0.50$ [85]. Também em uma certa linha do diagrama de fases de um processo de exclusão simples assimétrico com interação de segundos vizinhos bastante similar ao nosso

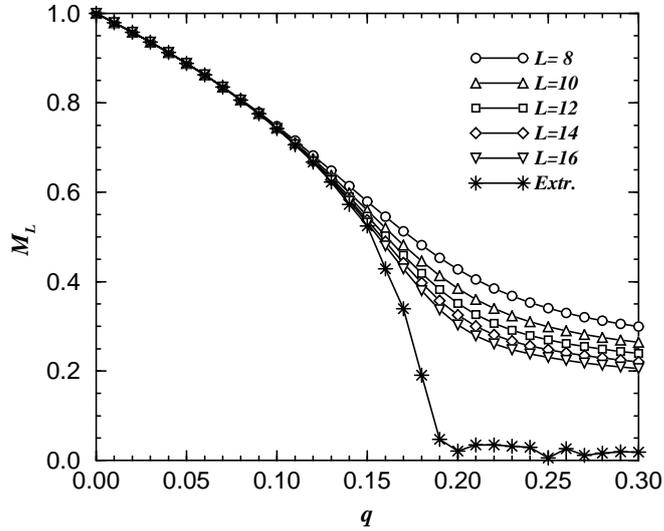


Figura 2.4: Parâmetro de ordem M_L para L par entre $L = 8$ e $L = 16$ junto da curva extrapolada.

modelo de crescimento de superfície encontrou-se que $\eta = 0.54 \pm 0.04$ [86]. No segundo dos trabalhos em [52], no entanto, o valor supostamente mais preciso de $\eta = 0.66 \pm 0.06$ foi publicado, empurrando as estimativas de η um pouco mais para cima. Nossos resultados com um funcional energia livre fora do equilíbrio, por outro lado, parecem indicar que o cenário da quebra espontânea de simetria nesses modelos é tipicamente de Ginzburg-Landau, o que seria consistente com um valor $\eta = \frac{1}{2}$. Acreditamos que resultados de simulações mais extensas podem vir a esclarecer este ponto, e pretendemos trabalhar nesta direção, principalmente através das técnicas de histograma que chamamos de funcional “energia livre” fora do equilíbrio, do qual oferecemos uma breve descrição a seguir.

2.5.4 Um funcional energia livre fora do equilíbrio

A fim de ilustrar o fenômeno de quebra espontânea de simetria mencionado acima, vamos nos concentrar em um funcional “energia livre” do parâmetro de ordem M_L . A sua definição vem de uma generalização do conceito de fase termodinâmica [87]. No *ensemble* canônico, uma fase de equilíbrio pura é definida de forma única pela

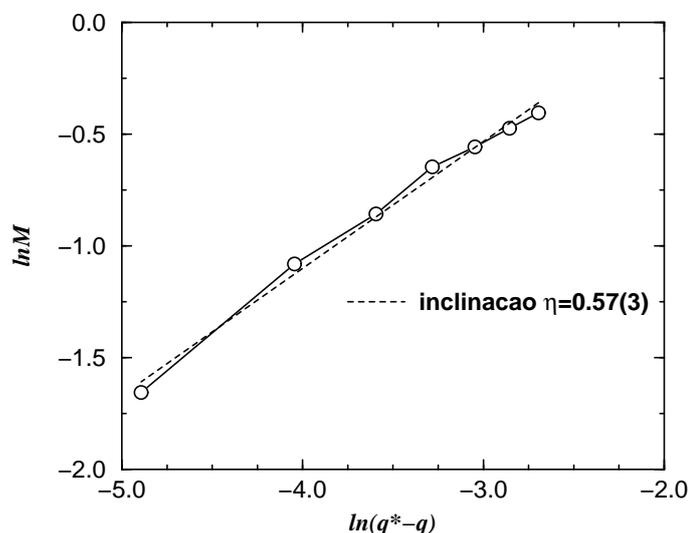


Figura 2.5: Gráfico de $\ln M \times \ln(q^* - q)$. A inclinação da regressão linear (LR) fornece o valor $\eta = 0.57 \pm 0.03$ para o expoente crítico.

sua medida de Gibbs, que é a medida de probabilidades que maximiza a entropia do sistema hamiltoniano subjacente no limite termodinâmico². Em analogia ao caso hamiltoniano, definimos, seguindo [55], uma fase fora do equilíbrio através de uma medida de probabilidades que seja estacionária pela dinâmica do processo e que não possa ser expressa como uma combinação linear de outras medidas estacionárias, caso elas existam; para sistemas finitos esta medida é sempre única [88]. Se insistirmos em escrever esta distribuição de probabilidades estacionária como a exponencial de alguma função “energia” (possivelmente não local), e a realizarmos em função de um parâmetro M das variáveis microscópicas, chegamos naturalmente ao conceito de um funcional energia livre fora do equilíbrio dado pelo limite termodinâmico de

$$F_L(M) = -\frac{1}{L} \ln P_L(M), \quad (2.28)$$

assumindo que o limite existe.

²Repare no entanto que quando a hamiltoniana do sistema contém parâmetros relacionados por operações de simetria mais de uma tal medida de Gibbs pode aparecer, dando origem a linhas de coexistência no diagrama de fases do modelo.

A definição de F_L acima difere de outras definições de um tal funcional na medida em que não o construímos a partir das probabilidades condicionais $P(X_{t'}|X_t)$ de observar a configuração $X_{t'}$ no instante t' dada a configuração X_t em um instante t anterior. Conforme já se reparou [55, 89, 90], a definição de uma função “energia” local na direção temporal através de

$$H(X_{t'}, X_t) = -\ln P(X_{t'}|X_t) \quad (2.29)$$

fornece, para um sistema d -dimensional, uma energia livre $d + 1$ -dimensional que vale zero em toda parte, independentemente da dinâmica microscópica, isso porque a conservação de probabilidades

$$\sum_{X_{t'}} P(X_{t'}|X_t) = 1, \quad (2.30)$$

faz com que a função de partição calculada a partir de H tenha sempre o valor um.

Nossas simulações de Monte Carlo foram feitas da seguinte maneira. A rede é inicializada lisa, com todas as alturas $h_\ell = 0$. Esta configuração inicial é relaxada, para um dado valor de q , através de L^2 passos de Monte Carlo (PMC), onde um PMC vale L tentativas de movimento. Amostramos então os valores de M_L a cada L PMC, acumulando os dados como um histograma normalizado, isto é, como $P_L(M)$ a partir da qual o funcional energia livre $F_L(M)$ segue de sua definição dada na eq. (2.28).

A medição de M_L envolveu um pequeno truque. Primeiro definimos uma rede auxiliar com o mesmo tamanho da rede “física”, porém ocupada pelos pseudo-spins $m_\ell = (-1)^{h_\ell}$. Efetuamos então o processo de crescimento somente nesta rede auxiliar, onde medimos diretamente o valor do parâmetro de ordem M_L . Isto é possível porque a dinâmica das variáveis m_ℓ é bastante simples: a cada processo elementar $(a, b) \rightarrow (c, d)$ na representação de *links* c_ℓ corresponde um *flip* $\pm \rightarrow \mp$ na representação de pseudo-spins, uma vez que cada processo elementar na representação de *links* corresponde a um processo de adsorção ou dessorção que muda a paridade da altura da coluna à qual o pseudo-spin está associado.

Os números pseudo-aleatórios que utilizamos foram obtidos a partir de um gerador do tipo *lagged Fibonacci*, baseado na recorrência $R_n \leftarrow (R_{n-p} + R_{n-q}) \bmod 2^b$, com o *lag pair* $(p, q) = (30, 127)$ e $b = 24$, uma vez que reais de 4 bytes na maioria dos computadores (aqueles conformantes com o padrão IEEE 754) têm 24 bits na fração³. Este gerador tem um período teórico de $2^{23}(2^{127} - 1) \simeq 1.43 \times 10^{45}$, bastante longo [91]. Sabemos que os geradores do tipo *lagged Fibonacci* falham em alguns testes de equidistribuição [91], porém eles se mostraram rápidos e bons o suficiente para nossa aplicação. De qualquer forma, a fim de minimizar os efeitos de correlação entre os números pseudo-aleatórios, intercalamos cada PMC “real” com um PMC “vazio” no qual jogamos fora L números aleatórios. Este procedimento, embora quase dobre o tempo das corridas, aumenta nossa confiança nos dados obtidos.

A fim de obter um histograma normalizado de boa qualidade, usamos redes relativamente pequenas, $L \leq 128$, e amostramos M_L um número bastante grande de vezes, tipicamente 2^{20} vezes, o que tornou nossas corridas de Monte Carlo relativamente longas, até 12 horas por ponto nos maiores casos (em um processador Alpha Digital de 300 MHz). Variando os valores de q obtemos um conjunto de curvas a partir das quais podemos visualizar a quebra espontânea de simetria e estimar o ponto crítico. Um desses conjuntos está mostrado na Figura 2.6.

A Figura 2.6 nos fornece um típico cenário de Ginzburg-Landau, envolvendo uma energia livre do tipo λM^4 . Podemos ver desta figura que o ponto crítico deve estar localizado em torno de $q = 0.186$. Para obtermos uma estimativa mais precisa do ponto crítico fazemos um gráfico de $\min_M \{|F_L(M)|\} \times q$, isto é, de $\langle M_L \rangle \times q$, que pode ser visto na Figura 2.7. Desta figura podemos estimar o ponto crítico em $q^* = 0.187 \pm 0.001$, de acordo com nossos outros resultados. O mais interessante deste cenário de Ginzburg-Landau é que ele fornece uma explicação para o expoente η associado ao parâmetro de ordem M : neste cenário, o expoente η nada mais é do que o expoente “magnético” $\beta = \frac{1}{2}$ clássico.

³Não é qualquer *lag pair* (p, q) que fornece um bom gerador de números pseudo-aleatórios. Alguns valores são $(p, q) = (24, 55), (38, 89), (37, 100), (83, 258), (273, 607)$, e $(1029, 2281)$. Para outros valores veja [91].

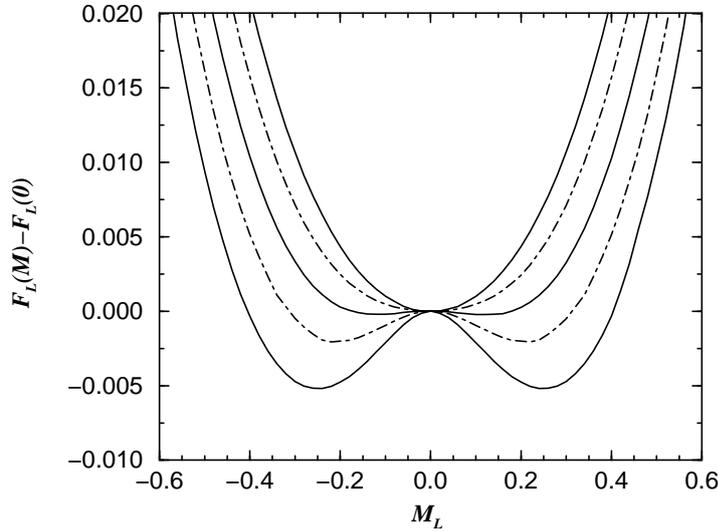


Figura 2.6: Funcional energia livre $F_L(M)$ para uma cadeia de $L = 128$ sítios e vários valores de q : de baixo para cima $q = 0.180, 0.182, 0.184, 0.186, e 0.188$. As curvas foram obtidas a partir de 2^{20} passos de Monte Carlo.

2.5.5 O parâmetro de ordem de string

A fim de entender melhor a natureza da transição de enrugamento, decidimos olhar mais de perto algumas configurações microscópicas típicas do modelo. A configuração mais rugosa possível é dada, na representação de *links* $c_\ell = h_{\ell+1} - h_\ell$, por $| + \dots + - - \dots - \rangle$, o estado de altura máxima no setor de carga total $Q = 0$. Em linguagem de spin, este estado corresponde a dois domínios separados por dois *kinks* antiferromagnéticos. As segundas configurações mais rugosas possíveis são aquelas nas quais comparece um par de 0's, por exemplo $| + \dots + 00 - \dots - \rangle$ ou $| 0 + \dots + - \dots - 0 \rangle$. Destes exemplos e das taxas de transição que definem o modelo, fica claro que o processo de alisamento da superfície ocorre através da aniquilação dos *kinks* antiferromagnéticos, enquanto a difusão de 0's introduz flutuações em seu perfil. É importante reparar que a ausência de dessorção de partículas a partir do meio de terraços lisos força uma certa ordem antiferromagnética entre os *links*, uma vez que eles apenas podem ser criados na forma de pares $+-$, nunca como pares $-+$, e desde que não há reações do tipo $+- \rightleftharpoons -+$, podemos ver que esta ordem

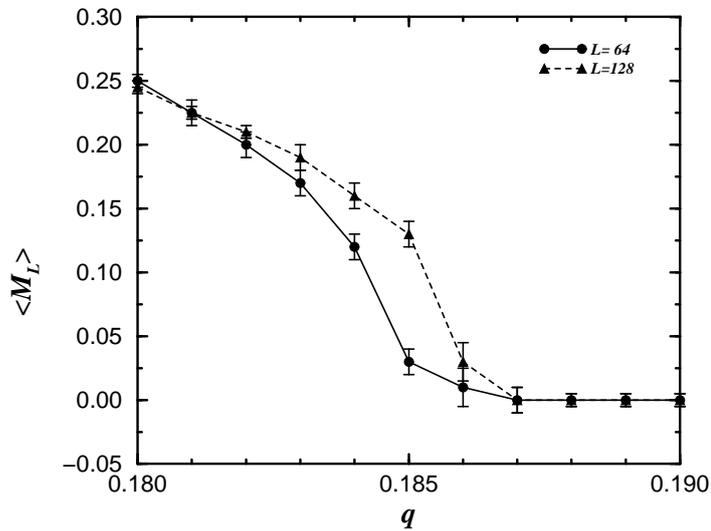


Figura 2.7: Parâmetro de ordem $\langle M_L \rangle$ versus q em redes de $L = 64$ e $L = 128$ sítios. Os pontos foram obtidos a partir de 2^{20} passos de Monte Carlo.

permanece tanto quanto os pares $+-$ sobreviverem às reações de aniquilação. Na fase rugosa de valores altos de q , os *links* do tipo $+$ movem-se preferencialmente para a esquerda, enquanto os *links* do tipo $-$ preferem se mover para a direita, eventualmente deixando um par de 0's entre eles que gera um novo par $+-$, levando a configurações cada vez mais rugosas, como por exemplo $|\cdots + +0 \cdots - 0 - \cdots\rangle$. Na fase lisa, de valores baixos de q , a difusão de *links* se torna mais simétrica e a segregação entre os tipos $+$ e $-$ de partícula menos eficiente, de tal forma que esperamos observar uma distribuição mais uniforme de pares $+-$ ao longo da rede do que na fase de valores altos de q .

No contexto de modelos de crescimento de cristais RSOS em duas dimensões e da conjectura de Haldane [92], previu-se [93] e logo depois verificou-se extensivamente [94, 95, 96, 97, 98, 99] que existe um tipo peculiar de ordem de longo alcance em antiferromagnetos de Heisenberg isotrópicos de spin inteiro. No estado fundamental dessas cadeias, esta ordem pode ser vista como feita de dipolos $+-$, não necessariamente próximos, dispersos por entre os 0's, formando o que passou a ser conhecido como um fluido de spin antiferromagnético. O parâmetro que

identifica esse tipo de ordem é o parâmetro de ordem de *string* [93]

$$O_{\pi}^z(\ell) = \left\langle S_1^z \exp \left(i\pi \sum_{n=1}^{\ell} S_n^z \right) S_{\ell}^z \right\rangle, \quad (2.31)$$

onde os parênteses retos indicam valor esperado no estado fundamental. Na fase com *gap*, de Haldane, do antiferromagneto de Heisenberg isotrópico, bem como na fase lisa dos modelos em [93], temos que $\lim_{\ell \rightarrow \infty} O_{\pi}^z(\ell) \neq 0$; para o antiferromagneto de Heisenberg isotrópico de spin $S = 1$ temos $O_{\pi}^z(\infty) = 0.374\,325\,096(2)$ [99].

Pelo que dissemos acima, está claro que a ordem de *string* é justamente o tipo de ordem que esperamos observar na fase lisa de nosso modelo. Procedemos então ao cálculo de $O_{\pi}^z(\ell)$ com $S_n^z = c_n$ e $\ell = L/2 + 1$, a distância máxima em uma cadeia fechada, e nossos resultados aparecem na Figura 2.8. Nossas extrapolações não ficaram muito boas para esse conjunto de dados, e não são mostradas na figura. O comportamento geral, no entanto, é bastante claro: acima do ponto crítico, $q > q^*$, $O_{\pi}^z(\ell)$ tende fortemente a zero, enquanto que para $q \leq q^*$ temos $\lim_{\ell \rightarrow \infty} O_{\pi}^z(\ell) \neq 0$. O ponto $q = 0$ é especial, uma vez que para $q = 0$ a superfície completamente lisa se torna um estado absorvente, e daí $O_{\pi}^z(\ell) = 0$ exatamente neste ponto. Conforme q aumenta a partir do zero, o fluido de spin antiferromagnético começa a se formar e $O_{\pi}^z(\ell)$ aumenta, até que em $q = q^*$ a assimetria nas taxas de difusão para os *links* rompe esta estrutura de fluido de spin, domínios começam a se formar e o parâmetro de ordem de *string* se anula. Podemos então ver que o parâmetro de ordem de *string* revela claramente que o mecanismo da transição de enrugamento corresponde ao rompimento dos pares de *links* antiferromagnéticos em estado fluido em favor da formação de domínios ordenados.

2.6 Conclusões e perspectivas

Neste trabalho efetuamos uma análise de *finite-size scaling* de um modelo de crescimento restrito de superfícies (*restricted solid-on-solid*) introduzido em [52] que, mesmo em uma dimensão, apresenta uma transição de fase de enrugamento acompanhada por uma quebra espontânea de simetria. O expoente crítico dinâmico do

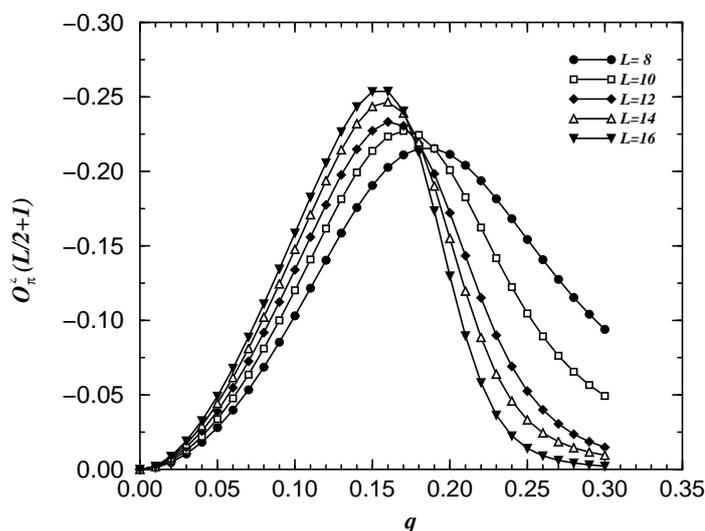


Figura 2.8: Parâmetro de ordem de *string* $O_{\pi}^z(L/2+1)$ para L par entre $L = 8$ e $L = 16$.

modelo foi calculado e encontramos que a transição de enrugamento pertence à classe de universalidade da percolação orientada, apresentando um cruzamento de comportamento crítico para a classe de universalidade de Kardar-Parisi-Zhang [39] em sua fase rugosa. Encontramos que o parâmetro de ordem M_L da transição de enrugamento vai a zero quando nos aproximamos do ponto crítico q^* como $M = \lim_{L \rightarrow \infty} M_L \propto (q^* - q)^\eta$, com um expoente $\eta = 0.57 \pm 0.03$, de acordo com valores previamente encontrados na literatura [52, 85, 86]. O cálculo do parâmetro de ordem de *string* $O_{\pi}^z(\ell)$ no estado estacionário do modelo revelou que a fase lisa, que apresenta um *gap* de massa, é desordenada com uma estrutura de *kinks* que forma um fluido antiferromagnético de spins análogo ao que se encontra nos antiferromagnetos de Heisenberg isotrópicos de spin inteiro, onde a fase desordenada é conhecida como fase de Haldane, embora seja dominada pela configuração completamente lisa, sem *kinks*. A transição de enrugamento pode então ser entendida no cenário de spins como uma ruptura na estrutura de longo alcance do fluido antiferromagnético em favor da formação de domínios ordenados, ferromagnéticos, que passam a se fundir impingindo à superfície uma velocidade de crescimento finita.

É possível estender um pouco mais a investigação desses modelos. A idéia

é quebrar explicitamente a simetria das taxas que definem o processo, da seguinte maneira [100]. No cenário de partículas, dobramos o número de sítios introduzindo entre duas ligações consecutivas $c_\ell, c_{\ell+1}$ uma variável não interagente $m_{\ell+1/2}$ assumindo dois valores possíveis, vamos chamá-los de + e -. Essas variáveis nada mais são que os pseudo-spins $(-1)^{h_\ell}$. Em nosso novo sistema, um processo elementar $(a_\ell, m_{\ell+1/2}, b_{\ell+1}) \rightarrow (c_\ell, -m_{\ell+1/2}, d_{\ell+1})$ tem sua taxa parametrizada por um “campo externo” $u \in [-1, 1]$ tal que agora ela depende de q e u através das combinações

$$p = q(1 - u) \quad \text{e} \quad \tilde{p} = q(1 + u) \quad (2.32)$$

de acordo com $\Gamma_{c,-,d}^{a,+,b} = \Gamma_{c,d}^{a,b}(p)$ e $\Gamma_{c,+,d}^{a,-,b} = \Gamma_{c,d}^{a,b}(\tilde{p})$, os papéis de p e \tilde{p} trocados sempre que tivermos um $\Gamma_{d,c}^{b,a} \neq 0$ para um dado $\Gamma_{c,d}^{a,b} \neq 0$. Por exemplo, $\Gamma_{0,-,1}^{1,+,0} = \frac{1}{2}(1 - p)$ e $\Gamma_{0,+,1}^{1,-,0} = \frac{1}{2}(1 - \tilde{p})$, mas $\Gamma_{1,-,0}^{0,+,1} = \tilde{p}$ e $\Gamma_{1,+,0}^{0,-,1} = p$. É claro que a escolha de quais das novas taxas vão usar p ou \tilde{p} com relação às taxas originais é imaterial, uma vez que uma escolha difere da outra apenas pela troca de u por $-u$. O papel do campo u é o de quebrar a simetria quiral do sistema com relação às taxas para os processos de difusão. Para este modelo estendido, podemos perguntar se ocorre quebra espontânea de simetria, com o parâmetro de ordem dado (como antes) por

$$M_L = \frac{1}{L} \sum_{\ell=1}^L m_{\ell+1/2}. \quad (2.33)$$

Quando aplicamos o campo u , ele desestabiliza uma das fases, “+” ou “-”, em favor da outra, e pode ser que para alguns valores de u observemos pontos espinodais, isto é, pontos no diagrama de fases para os quais a “energia livre” $F'(u) = F''(u) = 0$, possivelmente associados a expoentes críticos dinâmicos pouco usuais, por exemplo $z = 1$, uma vez que eles já foram observados em sistemas de partículas interagentes parecidos com este [59]. Cálculos preliminares [101] indicam que realmente existem pontos espinodais neste modelo, embora não saibamos ainda se z assume algum valor diferente daqueles já conhecidos para este modelo.

Alguns dos resultados deste capítulo apareceram em [53].

O processo de contato básico

Neste capítulo aplicamos idéias de *finite-size scaling* no estudo do processo de contato unidimensional, e desenvolvemos uma técnica para estudar propriedades dependentes do tempo de processos de Markov com estados absorventes em espaços de estado finitos.

3.1 Introdução

Em sua formulação original [102, 103], a conjectura da percolação orientada estabelecia que todas as transições de fase de segunda ordem entre uma fase ativa (com ruído) e um estado absorvente em sistemas de uma componente com parâmetro de ordem escalar e na ausência de simetrias extras estão na classe de universalidade de comportamento crítico da percolação orientada [104]. Sob essa forma, a conjectura foi verificada em uma grande quantidade de modelos, entre outros no processo de contato básico [88, 105], nos modelos de Schlögl para reações químicas autocatalíticas [106], e em uma teoria clássica de campos fenomenológica para processos de colisão hadrônica em altas energias [107, 108, 109, 110]. Investigações posteriores revelaram que a classe de universalidade da percolação orientada é bastante robusta, e verificou-se que alguns modelos com mais de uma componente [111, 112, 113, 114] ou mais de um estado absorvente, em alguns casos, com um número infinito de estados absorventes [115, 116, 117, 118, 119] apresentam expoentes críticos da percolação orientada. Até mesmo alguns modelos de crescimento de superfície sem nenhum estado absorvente apresentam expoentes críticos da percolação orientada [52, 53, 120].

Neste capítulo calculamos os expoentes críticos $z = \nu_{\parallel}/\nu_{\perp}$, ν_{\perp} , e δ (veja a definição de δ abaixo) da classe de universalidade da percolação orientada através da diagonalização numérica exata do operador de evolução temporal do processo de contato básico unidimensional. O método utilizado está baseado no conhecido método da potência (veja o Apêndice A), modificado para levar em conta a presença de um estado absorvente no processo. O cálculo de δ envolveu a investigação das propriedades dependentes do tempo do processo, e neste trabalho mostramos como se pode fazer isto a partir do operador de evolução do processo e do método da potência. Tentativas de se aplicar idéias de grupo de renormalização fenomenológico a problemas “direcionados” na rede existem desde pelo menos o trabalho de W. Kinzel e J. Yeomans [104], e têm reaparecido na literatura de tempos em tempos com variados graus de sofisticação [121]. A aplicação da formulação em termos de cadeias quânticas para processos de Markov na rede para se estudar propriedades dependentes do tempo, no entanto, quase não vem sendo explorada; aparentemente a única referência nesta área anterior ao presente trabalho é [122]. Neste trabalho mostramos como se deve escolher a escala de tempo microscópica que maximiza a eficiência do método e fornece a evolução temporal correta.

3.2 O processo de contato básico unidimensional

O processo de contato básico [88, 105] pode ser visto como um modelo para o avanço de uma epidemia entre indivíduos que vivem em uma rede em d dimensões. Neste processo, um indivíduo saudável \emptyset se infecta a uma taxa proporcional ao número de seus vizinhos infectados, enquanto um indivíduo infectado X se recobra espontaneamente a uma taxa unitária. Em uma dimensão, podemos visualizar estes processos como $X\emptyset\emptyset \xrightarrow{\lambda} XX\emptyset$, $\emptyset\emptyset X \xrightarrow{\lambda} \emptyset XX$, $X\emptyset X \xrightarrow{2\lambda} XXX$, e $X \xrightarrow{1} \emptyset$. Conforme o valor de λ cresce, o processo de contato básico sofre uma transição entre as fases de extinção (todos os indivíduos saudáveis) e sobrevivência (pelo menos um indivíduo infectado) em qualquer dimensão d , sendo que a dimensão crítica superior d^* para este processo é $d^* = 4$. Não existe um cálculo exato do ponto crítico λ^* para $d < d^*$, mas existem algumas cotas bastante estreitas: em uma dimensão sabe-se que $1.539 < \lambda^* < 1.942$ [123].

De acordo com o formalismo apresentado no Capítulo 2, obtemos o operador de evolução temporal para o processo de contato básico a partir da matriz de três corpos

$$H_{\ell-1,\ell,\ell+1} = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & 1 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & -\lambda & \cdot & 1 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & -1 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \lambda & \cdot & -1 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & -\lambda & \cdot & 1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & -2\lambda & \cdot & 1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \lambda & \cdot & -1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 2\lambda & \cdot & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.1)$$

onde agora ordenamos os vetores da base de três corpos lexicograficamente, $(\emptyset, \emptyset, \emptyset) < (\emptyset, \emptyset, X) < \dots < (X, X, \emptyset) < (X, X, X)$, e os pontos indicam elementos nulos. Repare que escrevemos este operador na forma $H_{\ell-1,\ell,\ell+1} = H_{\ell-1,\ell,\ell+1}^{(3)} + \mathbf{1} \otimes H_{\ell}^{(1)} \otimes \mathbf{1}$, onde o termo $H_{\ell-1,\ell,\ell+1}^{(3)}$ representa os processos elementares de três corpos $X\emptyset\emptyset \rightarrow XX\emptyset$, $\emptyset\emptyset X \rightarrow \emptyset XX$, e $X\emptyset X \rightarrow XXX$, e o termo $H_{\ell}^{(1)}$ indica o termo de um corpo $X \rightarrow \emptyset$. Curiosamente, sob condições de contorno periódicas o operador acima pode ser escrito como um operador de dois corpos. Identificando um indivíduo saudável \emptyset com o estado de spin para cima e um indivíduo infectado com o estado de spin para baixo na base diagonal na matriz de Pauli σ^z , a matriz $H_{\ell-1,\ell,\ell+1}$ é equivalente à cadeia quântica não hermitiana

$$H_{\ell,\ell+1} = -\frac{\lambda}{4} \left(2\sigma_{\ell}^x + 2i\sigma_{\ell}^y + \sigma_{\ell}^x \sigma_{\ell+1}^z + \sigma_{\ell}^z \sigma_{\ell+1}^x + i\sigma_{\ell}^y \sigma_{\ell+1}^z + i\sigma_{\ell}^z \sigma_{\ell+1}^y \right) + \frac{\lambda}{2} \left(1 - \sigma_{\ell}^z \sigma_{\ell+1}^z \right) + \frac{1}{2} \left(1 - \sigma_{\ell}^x + i\sigma_{\ell}^y + \sigma_{\ell}^z \right), \quad (3.2)$$

onde as matrizes $\sigma^{x,y,z}$ são as matrizes de Pauli de spin $\frac{1}{2}$ usuais,

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Na prática, é a cadeia quântica (3.2) que analisamos neste trabalho.

3.3 O métodos da potência

A aplicação das técnicas de *finite-size scaling* dependem do cálculo do primeiro *gap* do operador de evolução H do processo, conforme já vimos no Capítulo 2. Existem várias técnicas disponíveis para se calcular esses *gaps*. Quando H é uma matriz simétrica, o melhor método sem dúvida é o método de Lanczos. Para processos estocásticos, no entanto, H em geral é não simétrico, e muito embora existam generalizações do algoritmo de Lanczos para matrizes não simétricas, tais como o algoritmo de Arnoldi utilizado no Capítulo 2, eles em geral demandam muita memória ou são intrinsecamente instáveis [124]. Uma vez que estamos interessados em apenas um autovalor de H , o mais preciso possível, escolhemos desta vez trabalhar com o método da potência, que requer apenas multiplicações de matriz por vetor que podem ser implementadas usando-se tipos de dados de alta precisão, e não requer uma diagonalização usual (“QR”) no final, uma etapa que pode introduzir erros nos dados. O fato de estarmos lidando com um processo que possui um estado absorvente foi decisivo na nossa escolha pelo método da potência, uma vez que ele permite que exploremos este fato, como segue.

A fim de se aplicar o método da potência, primeiro definimos a matriz $T = 1 - \tau H$. Esta matriz deve ser encarada como o operador de evolução de uma cadeia de Markov em tempo discreto cujas transições ocorrem em intervalos τ . Para que T seja uma matriz estocástica consistente com esta interpretação, seus elementos devem satisfazer a $0 \leq T(\tilde{n}, \mathbf{n}) \leq 1$ e $\sum_{\tilde{n}} T(\tilde{n}, \mathbf{n}) = 1$. Esta última condição sempre é satisfeita, uma vez que $\sum_{\tilde{n}} H(\tilde{n}, \mathbf{n}) = 0$. A primeira condição, no entanto, demanda que $\tau^{-1} \geq \max\{H(\tilde{n}, \mathbf{n})\} = \max\{H(\mathbf{n}, \mathbf{n})\}$. Uma vez que vamos calcular os autovalores de T (na verdade, apenas o segundo maior autovalor) por uma técnica puramente iterativa, obteremos a maior taxa de convergência possível se escolhermos o maior τ possível, de forma que tomamos $\tau^{-1} = 1.01 \times \max\{H(\mathbf{n}, \mathbf{n})\}$. Ao contrário do que pode parecer, não se deve tomar $\tau^{-1} = \max\{H(\mathbf{n}, \mathbf{n})\}$ porque isto zera alguns dos elementos da diagonal de T (pelo menos um), introduzindo ciclos em uma cadeia de Markov irreduzível. Repare que os espectros de H e T aparecem em ordem contrária, com o maior autovalor de T correspondendo ao

menor autovalor de H , o que facilita a aplicação do método da potência¹.

A escolha acima para a escala de tempo microscópica τ para o processo em tempo discreto corresponde a exigir que a probabilidade de duas transições ocorrerem simultaneamente neste processo sejam pequenas, de ordem $o(\tau)$. Isso pode ser visto da seguinte forma. A solução formal da equação mestra em forma operatorial é

$$|P(t)\rangle = \exp(-Ht)|P(0)\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{k!} (-H)^k |P(0)\rangle. \quad (3.3)$$

Em princípio, a expansão da função exponencial em sua série de potências fornece uma maneira de se calcular as probabilidades transientes $|P(t)\rangle$ para qualquer valor de t apenas pela aplicação sucessiva de H . Pode-se mostrar, no entanto, que este método fornece resultados muito ruins quando aplicado ingenuamente, pois o erro de truncagem obtido ao substituímos o limite superior $k = \infty$ do somatório por um número finito k qualquer (que na prática nunca passa de $k \sim 10-30$, dependendo do tamanho da matriz) é incontrolável, dependendo fortemente da norma da matriz H . Portanto, quando $\|H\|$ ou t são muito grandes, a expansão em série da exponencial não serve ao propósito de se calcular $|P(t)\rangle$. Na verdade, existem várias maneiras muito ruins de se calcular a exponencial de uma matriz, como discutido em [125]. Em termos da matriz T , de outra forma, a eq. (3.3) fica

$$|P(t)\rangle = \exp((T - 1)t/\tau) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(t/\tau)^k}{k!} e^{-t/\tau} T^k |P(0)\rangle. \quad (3.4)$$

Observe agora que a expansão em série da exponencial na equação acima contém a função de distribuição para um processo de Poisson $\{X_t, t \geq 0\}$, de acordo com a qual

$$\mathbb{P}\{X_t = k\} = \frac{(t/\tau)^k}{k!} e^{-t/\tau}, \quad k \geq 0, \quad t \geq 0. \quad (3.5)$$

Podemos interpretar o processo estocástico em tempo contínuo $\{X_t, t \geq 0\}$ como

¹De outra forma teríamos de usar o método da potência inverso, que requer a decomposição LU de H e a solução de dois sistemas lineares a cada passo, aumentando a complexidade e o tempo de execução do método.

um processo em tempo discreto com matriz de transição T mergulhado (*embedded*) em um processo de Poisson de taxa τ^{-1} , isto é, a probabilidade de observarmos k transições do processo discreto em um intervalo de tempo t segue um processo de Poisson de parâmetro t/τ . Nossa escolha de τ faz então com que a aproximação $\exp(-\tau H) \simeq 1 - \tau H$ para o semigrupo de Markov seja exata no que tange à dinâmica, isto é, ela preserva a estocasticidade da dinâmica, e os vetores evoluídos no tempo $|P(t + \tau)\rangle = \exp(-\tau H)|P(t)\rangle$ e $|P(t + \tau)\rangle = (1 - \tau H)|P(t)\rangle = T|P(t)\rangle$ coincidem até ordem $o(\tau)$. Basta tomar $t = \tau$ e $k = 1$ em (3.5) para se chegar a essas conclusões.

A construção da matriz T apresentada acima junto da escolha apropriada de τ com o propósito de se estudar propriedades dependentes do tempo em processos estocásticos é bem conhecida em teoria de filas, onde com alguns poucos refinamentos ela é conhecida como método da uniformização [126, 127].

No processo de contato básico em um volume finito, o estado estacionário único é dado pelo estado absorvente $|\mathbf{0}\rangle = |0, 0, \dots, 0\rangle$. Este conhecimento *a priori* torna possível o cálculo do segundo maior autovalor de T , correspondendo ao *gap* de H , simplesmente ortogonalizando o vetor iterado do método da potência com relação ao estado estacionário a cada iteração. Dessa forma ficamos com uma versão do método da potência que se implementa como

$$|P(m + 1)\rangle = (T - |\mathbf{0}\rangle\langle\mathbf{0}|)|P(m)\rangle,$$

na qual m está em unidades de τ . Esperamos que após sucessivas aplicações dessa relação alcancemos um ponto fixo $E^*|P^*\rangle = T|P^*\rangle$, onde $E^* = \langle P^*|T|P^*\rangle / \langle P^*|P^*\rangle = 1 - \tau E^{(1)}$ e $|P^*\rangle$ é uma combinação linear de estados de uma partícula. A vantagem de se estar lidando com um estado absorvente ao invés de um estado estacionário determinado numericamente é que aquele em geral é um estado “puro”, como em nosso caso, ou então um estado bastante simples de coeficientes conhecidos, por exemplo ruído branco, um fato que minimiza os inevitáveis erros de arredondamento numérico e torna os cálculos mais rápidos e confiáveis. Em nossos cálculos, consideramos um autovalor estável após ele coincidir com seus antecessores mais de 64 vezes em mais de uma parte em $2^{112} \simeq 5.2 \times 10^{33}$.

A caracterização completa da classe de universalidade da percolação orientada requer o cálculo de mais um expoente além de z e ν_{\perp} , sendo que todos os outros expoentes podem daí ser obtidos a partir de relações de escala e hiperescala [109, 128]. Um expoente facilmente calculável é δ , definido através do comportamento assintótico da probabilidade de sobrevivência no ponto crítico λ^* como

$$P_{\text{surv}}(t) = \sum_{\mathbf{n} \neq \mathbf{0}} P(\mathbf{n}, t) \stackrel{t \rightarrow \infty}{\propto} t^{-\delta} (1 + at^{-\delta'} + \dots). \quad (3.6)$$

Um gráfico logarítmico de $P_{\text{surv}}(t)$ versus t para um sistema infinito deve ser uma linha reta, com o coeficiente angular dado por δ . O expoente de correção δ' aparentemente é dado por $\delta' = 1$ [129]. Para sistemas finitos, no entanto, o espectro do operador de evolução sempre apresenta um *gap*, e a probabilidade de sobrevivência invariavelmente entra em um regime de decaimento exponencial governado por este *gap*. A fim de acompanhar a evolução temporal do processo antes de ele atingir o estado absorvente, tomamos um valor pequeno para τ na definição de T e sucessivamente calculamos $|P(m+1)\rangle = T|P(m)\rangle$. Neste trabalho usamos $\tau^{-1} = 1000 \times \max\{H(\mathbf{n}, \mathbf{n})\}$. O estado inicial usado corresponde ao estado com uma única partícula localizada na origem, $|P(0)\rangle = |1, 0, \dots, 0\rangle$. Um gráfico de $P_{\text{surv}}(t)$ versus t para um sistema de $L = 16$ sítios aparece na Figura 3.1. Desta figura podemos ver claramente que após um período inicial no qual os “modos” mais altos são amortecidos, a curva entra em um regime de decaimento algébrico quase puro, até que o *gap* se manifesta e começamos a observar o decaimento exponencial esperado em um sistema finito. Podemos ver isto mais facilmente da figura menor inserida na Figura 3.1, que mostra a derivada de $\log P_{\text{surv}}(t)$ com relação a $\log t$, isto é, o valor instantâneo de δ_L .

3.4 Expoentes críticos

O cálculo do ponto crítico e dos expoentes críticos z e ν_{\perp} para o processo de contato básico seguiu o esquema apresentado no Capítulo 2. Nossos resultados para λ^* , z , ν_{\perp} e δ estão resumidos na Tabela 3.1. Os valores extrapolados nesta tabela foram obtidos com o algoritmo de Bulirsch-Stoer [83]. As derivadas necessárias

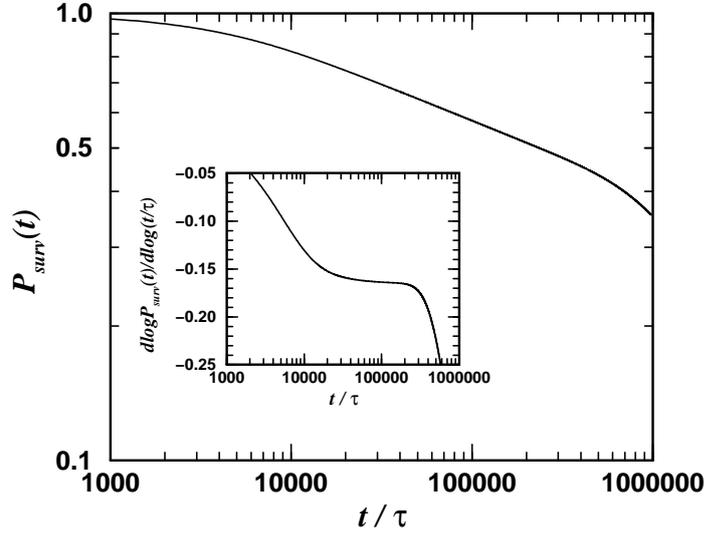


Figura 3.1: Probabilidade de sobrevivência em $\lambda = \lambda_L^*$ para um sistema de $L = 16$ sítios. A figura menor mostra o valor instantâneo do expoente crítico δ_L .

para o cálculo de ν_{\perp} foram obtidas com uma fórmula de diferenças simétrica de nove pontos, com um erro estimado de ordem $O(h^9)$ [130], enquanto os valores de δ foram obtidos de regressões lineares para $\log P_{\text{surv}}(t)$ na região de decaimento algébrico de $P_{\text{surv}}(t)$, tipicamente usando 100 pontos com os pontos separados por um intervalo de tempo $\Delta t = 100\tau$. Os números na Tabela 3.1 indicam que o comportamento crítico do processo de contato básico pertence à classe de universalidade da percolação orientada com um alto grau de precisão. Eles concordam bastante bem com aqueles obtidos por outras técnicas, a saber, expansões de altas temperaturas para um modelo correlato de spins quânticos [107], outros estudos de *finite-size scaling* [121], teoria de perturbação dependente do tempo [131], e expansões em séries e análises em termos de aproximantes diferenciais [84]. Os melhores valores de z , ν_{\perp} , e δ até o momento são dados por $z = 1.580745(6)$, $\nu_{\perp} = 1.096854(2)$, e $\delta = 0.159463(5)$ [84]; este último valor foi estimado de acordo com uma relação de hiperscala. Nossa estimativa para λ^* é melhor que aquelas atualmente disponíveis na literatura de processos de contato [123, 131]. Muito embora nossa determinação de δ não tenha sido tão precisa quanto a de

Tabela 3.1: Dados de tamanho finito e valores extrapolados para o ponto crítico λ^* e os expoentes $z = v_{\parallel}/v_{\perp}$, v_{\perp} e δ do processo de contato básico unidimensional. Os números entre parênteses representam os erros estimados na última casa de cada dado, enquanto aqueles dados sem um erro associado são numericamente precisos até as casas mostradas.

L', L, L''	λ_L^*	z_L	$v_{\perp, L}$	δ_L
7,8,9	1.629 092 086 131	1.495 084 128 194	0.963 208 351 697	0.1657(2)
8,9,10	1.632 522 345 029	1.502 980 235 818	0.977 844 866 308	0.1656(2)
9,10,11	1.635 178 201 359	1.509 743 775 238	0.989 427 140 315	0.1654(2)
10,11,12	1.637 262 542 035	1.515 558 577 190	0.998 833 401 056	0.1653(2)
11,12,13	1.638 921 714 266	1.520 588 023 063	1.006 632 974 979	0.1651(2)
12,13,14	1.640 260 494 445	1.524 967 656 357	1.013 211 430 501	0.1649(2)
13,14,15	1.641 354 409 414	1.528 807 324 384	1.018 839 364 776	0.1647(1)
14,15,16	1.642 258 557 889	1.532 195 497 121	1.023 712 402 567	0.1645(1)
15,16,17	1.643 013 687 274	1.535 203 516 105	1.027 975 558 429	0.1644(1)
16,17,18	1.643 650 350 303	1.537 889 180 610	1.031 738 664 206	0.1643(1)
17,18,19	1.644 191 762 995	1.540 299 611 765	1.035 086 466 706	0.1641(1)
18,19,20	1.644 655 789 991	1.542 473 490 560	1.038 085 430 711	0.1640(1)
Extrapolado [ω_{BST}]	1.648 96(2) [1.071]	1.580 77(2) [1.171]	1.096 81(2) [0.895]	0.162(2) [2.701]

z ou v_{\perp} , ela é precisa o suficiente para se distinguir entre possíveis classes de universalidade que possam aparecer em sistemas de partículas interagentes fora do equilíbrio com estados absorventes, a saber, a classe da percolação orientada, e a classe dos passeios aleatórios *branching and annihilating* com número par de “filhotes”, para o qual $\delta \simeq 0.286$ [132]². Uma alternativa para se estimar δ seria determinar cada δ_L como o valor da deriva do respectivo $\log P_{\text{surv}}(t)$ com relação a $\log t$ em seu ponto de inflexão, veja a Figura 3.1. Este procedimento oferece uma determinação de δ_L mais “local” que o ajuste de uma reta a $\log P_{\text{surv}}(t) \times \log t$ sobre dezenas ou centenas de pontos, e uma vez que se consiga estimar corretamente os erros neste cálculo, pode levar a uma determinação mais precisa de δ . Esperamos realizar este estudo em uma próxima oportunidade.

²O caso dos passeios aleatórios *branching and annihilating* com $n = 2$ filhotes são excessão e não apresentam uma transição de fases, estando sempre na fase inativa [133].

3.5 Conclusões e perspectivas

Neste capítulo apresentamos uma aplicação das idéias de *finite-size scaling* e do método da potência ao processo de contato básico em uma dimensão. Obtivemos valores precisos para o ponto crítico λ^* e os expoentes críticos z e ν_{\perp} , e também uma boa estimativa para o expoente δ . O método de projeção utilizado por nós se mostrou eficiente e é facilmente implementável. Uma vez que levou menos de 500 horas de CPU em uma máquina de 300 MHz para coletar os dados da Tabela 3.1 e que nos maiores casos utilizamos apenas 21 Mb de memória para levar os cálculos a cabo, acreditamos que o método é bastante competitivo com relação a outros métodos numéricos no caso de sistemas com estados absorventes. Nossos métodos podem ser estendidos a casos mais gerais, por exemplo a sistemas com mais de um estado absorvente ou em mais de uma dimensão, de maneira bastante imediata. Uma vez que não obtivemos resultados muito bons para o expoente δ , ao contrário do que ocorreu com os outros dois expoentes que calculamos, pretendemos investigar a relação que este expoente tem com as propriedades espectrais do operador de evolução temporal do processo, de forma que possamos vir a estender as idéias de *finite-size scaling* para o cálculo de δ sem termos de efetuar simulações dependentes do tempo.

Os resultados deste capítulo foram originalmente publicados em [134].

Dinâmica de interfaces no modelo de Ising estocástico

Neste capítulo investigamos a dinâmica de uma interface no modelo de Ising bidimensional estocástico com condições de contorno helicoidais sob a ação de um campo externo. A baixas temperaturas e para campos externos fracos, a dinâmica da interface pode ser descrita por um modelo exatamente solúvel pelo *ansatz* de Bethe. O gerador infinitesimal do processo é equivalente a um hamiltoniano quântico não hermitiano de grandes spins ($S \geq \frac{1}{2}$), que nada mais é que o gerador infinitesimal do processo *zero range*. Calculamos exatamente o expoente crítico dinâmico do processo, e mostramos que ele pertence à classe de universalidade de comportamento crítico de Kardar-Parisi-Zhang.

4.1 Introdução

A dinâmica de interfaces no modelo de Ising bidimensional sempre foi um tópico muito investigado devido à sua conexão com um grande número de fenômenos muito interessantes em física, tais como a dinâmica de transições de fase de primeira ordem e decomposição espinodal, metaestabilidade e *coarsening*, cinética de crescimento de domínios magnéticos, o enrugamento de superfícies em equilíbrio e fora dele, e também tem sido investigado com relação a alguns sistemas de partículas interagentes para os quais existe um grande número de resultados matematicamente rigorosos. Para revisões sobre esses assuntos e para uma lista extensiva de referências, veja [70, 88, 135, 136, 137].

Mapeamentos das configurações de interface do modelo de Ising são conhecidas desde pelo menos o trabalho de Rost [138], e vêm sendo bastante exploradas

desde então [28, 139, 140, 141, 142, 143, 144, 145, 146, 147]. Em alguns desses estudos [28, 139, 140, 141], a dinâmica das interfaces do modelo de Ising bidimensional em temperatura zero e na ausência de campos externos foi mapeada no processo de exclusão simples simétrico, com o principal resultado do ponto de vista da dinâmica das interfaces sendo a solução de um problema de primeira passagem que mostra que a área perdida por uma região (uma *droplet*) da fase minoritária sob uma dinâmica não conservativa cresce linearmente no tempo, isto é, que o tempo de vida médio de uma ilha da fase minoritária é proporcional à sua área inicial, fornecendo assim uma fundamentação microscópica para este fato bem conhecido. Também reconheceu-se em [28, 141] que o processo de exclusão resultante pode ser visto como um autômato celular probabilístico cuja matriz de transição é equivalente à matriz de transferência em uma direção diagonal do modelo de seis vértices em uma de suas linhas críticas [148]. A relação entre os processos de exclusão, modelos de vértices, e interfaces foi explorada em [29, 149, 150], onde se percebeu que um hamiltoniano de Heisenberg com termos de Dzyaloshinsky-Moriya de acoplamento imaginário puro que comuta com a matriz de transferência do modelo de seis vértices corresponde ao gerador infinitesimal do processo de exclusão simples assimétrico que descreve um processo de crescimento de superfícies conhecido como modelo *single step*, bem como uma versão de velocidades discretas ($\pm v$) da equação de Burgers com ruído, que por sua vez está relacionada com a equação de Kardar-Parisi-Zhang [39, 40]; veja o Apêndice B para algumas destas conexões. Por outro lado, uma grande quantidade de resultados obtidos primeiramente para o processo de exclusão simples assimétrico encontraram sua tradução para o problema de interfaces no modelo de Ising e, em particular, a investigação do movimento de partículas marcadas (*tagged particles*), introduzida no estudo do comportamento hidrodinâmico dos processos de exclusão [153, 154, 155], forneceu uma explicação parcial para as características dos diferentes regimes assintóticos encontrados em modelos unidimensionais estocásticos de crescimento de superfícies [143, 144, 145].

Neste capítulo investigamos a dinâmica de uma interface no modelo de Ising estocástico bidimensional na presença de um campo externo. Mostramos que sob condições generalizadas (porém bastante naturais) de contorno, a dinâmica da in-

terface pode ser mapeada em um sistema de partículas que saltam em uma rede unidimensional sem sofrerem exclusão. Na literatura matemática este processo é conhecido como processo *zero range* [156, 157, 158, 159]. Uma excelente revisão do processo *zero range* em nível elementar tendo em vista uma audiência de físicos pode ser encontrada em [160]. O processo resultante é similar a um modelo introduzido em [161], e corresponde ao limite $q \rightarrow \infty$ de um modelo de bósons q -deformados [162]. O gerador infinitesimal do processo *zero range* pode ser identificado com um hamiltoniano quântico não hermitiano de grandes spins, $S \geq \frac{1}{2}$, que é o logaritmo da matriz de transferência de um modelo de vértices exatamente solúvel pelo *ansatz* de Bethe [42, 163, 164].

Na seção 4.2 introduzimos o modelo de Ising estocástico bidimensional na presença de um campo externo, e as taxas de banho térmico de um *flip* em termos das quais vamos analisar a dinâmica da interface. Na seção 4.3 mostramos que a interface pode ser descrita pelo processo *zero range*, e exibimos o gerador infinitesimal deste processo como uma cadeia quântica não hermitiana. Na seção 4.4 obtemos a resolução exata do autoespectro deste gerador usando o *ansatz* de Bethe, e calculamos o expoente crítico dinâmico do processo. A seção 4.5 contém um resumo de nossos resultados e algumas perspectivas.

4.2 Descrição do modelo

O modelo de Ising bidimensional em um campo externo é descrito pela hamiltoniana

$$H(\{S\}) = -J \sum_{\langle r, r' \rangle} S_r S_{r'} - B \sum_r S_r, \quad (4.1)$$

onde $\{S\} = \{S_r, \mathbf{r} \in \Lambda_N\}$, $S_r \in \{-1, +1\}$ são spins de Ising, $\Lambda_N \subseteq \mathbb{Z}^2$ é um membro de uma família de redes semi-infinitas de $|\Lambda_N| = \infty \times L$ sítios, e $\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle$ indica pares de sítios vizinhos mais próximos em Λ_N . O índice $N \in \mathbb{N}$ em Λ_N se refere às condições de contorno que adotamos para Λ_N , que são livres na direção infinita e helicoidal com passo N na direção finita, isto é, $\mathbf{r} + Li + N\mathbf{j} \equiv \mathbf{r}, \forall \mathbf{r} \in \Lambda_N$. Quando $N = 0$ recuperamos as condições de contorno usuais, que no entanto não são interessantes para o nosso problema, como veremos. Em $H(\{S\})$ tomamos $J > 0$ e $B \geq 0$.

Introduzimos uma dinâmica nos spins de Ising através da equação mestra

$$\frac{dP(\{S\}, t)}{dt} = \sum_{\{\tilde{S}\}} \left[W(\{\tilde{S}\} \rightarrow \{S\}) P(\{\tilde{S}\}, t) - W(\{S\} \rightarrow \{\tilde{S}\}) P(\{S\}, t) \right] \quad (4.2)$$

para a probabilidade $P(\{S\}, t)$ de observar a configuração $\{S\}$ no instante t , onde $W(\{S\} \rightarrow \{\tilde{S}\})$ é a taxa segundo a qual a configuração $\{\tilde{S}\}$ é alcançada a partir da configuração $\{S\}$ por unidade de tempo. As taxas $W(\{S\} \rightarrow \{\tilde{S}\})$ devem ser invariantes translacionais e verificar a condição de balanceamento detalhado $W(\{\tilde{S}\} \rightarrow \{S\}) P(\{\tilde{S}\}) = W(\{S\} \rightarrow \{\tilde{S}\}) P(\{S\})$, com $P(\{S\})$ a distribuição de probabilidades canônica usual $P(\{S\}) \propto \exp[-\beta H(\{S\})]$. Vamos considerar taxas de transição de banho térmico de um *flip* dadas por

$$W(\{S\} \rightarrow \{\tilde{S}\}) \equiv W(S_r \rightarrow \tilde{S}_r) = \frac{1}{Z_r} \exp[-\beta H(S_r)], \quad (4.3)$$

onde

$$Z_r = \sum_{S_r} \exp[-\beta H(S_r)] \quad \text{e} \quad H(S_r) = -J \sum_{\langle r':r \rangle} S_r S_{r'} - B S_r, \quad (4.4)$$

onde $\langle r' : r \rangle = \{r' \in \Lambda : |r' - r| = 1\}$. Repare que no caso do modelo de Ising estas taxas são idênticas às taxas de Glauber [25], o que não ocorre com modelos mais complicados, de mais de dois estados, por exemplo.

Seja $w(S_r) = \frac{1}{2} \sum_{\langle r':r \rangle} |S_{r'} - S_r|$ o número de spins vizinhos mais próximos de S_r que têm o sinal oposto ao de S_r . Em termos de $w(S_r)$, reescrevemos as taxas (4.3) como

$$W(S_r \rightarrow \tilde{S}_r) = \frac{1}{1 + \exp\{-2\beta[-J(4 - 2w(S_r)) - B S_r]\}}. \quad (4.5)$$

A temperaturas suficientemente baixas, e para $B < 2J$, spins com $w(S_r) = 0, 1$ dificilmente vão se reverter, porque suas taxas de transição se tornam exponencialmente pequenas quando comparadas às outras taxas, da ordem de $\exp[-2\beta(2J - B)]$ no máximo. Isto ocorre essencialmente porque o aumento de entropia não compensa a criação de paredes de domínio abaixo da temperatura crítica. Processos com

$w(S_r) = 3, 4$ correspondem aos processos rápidos, já que a baixas temperaturas, e de novo para $B < 2J$, suas taxas se tornam de ordem um, $W(S_r \rightarrow \tilde{S}_r) = 1 - \exp[-2\beta(2J - B)]$ no mínimo. No limite de baixas temperaturas $\beta \rightarrow \infty$ e no regime de campos $B < 2J$, portanto, as taxas de banho térmico de um *flip* (4.3) definem um processo no qual apenas spins com $w(S_r) \geq 2$ têm uma probabilidade apreciável de se reverter, e de agora em diante vamos ignorar os processos associados com spins de $w(S_r) < 2$. Spins com $w(S_r) = 3, 4$, por sua vez, podem ser evitados pela escolha da condição inicial especial na qual a fase “+” está separada da fase “-” por uma única interface sem “ganchos”, isto é, por uma interface unívoca sem auto-intersecções, como na Figura 4.1. Com condições iniciais deste tipo, e no regime de baixas temperaturas e campos, obtemos um processo no qual apenas os spins com $w(S_r) = 2$ se revertem. Uma vez que spins com $w(S_r) = 2$ são aqueles localizados na interface, vemos que a dinâmica de um *flip* definida acima na verdade define uma dinâmica de interfaces. Na próxima seção veremos como se pode mapear esta dinâmica de interfaces em um sistema de partículas interagentes em uma rede unidimensional.

4.3 Mapeamentos para processos de difusão

Existem várias possibilidades de se mapear a dinâmica de interfaces do modelo de Ising em um sistema de partículas interagentes. Uma possibilidade consiste em associar uma partícula a cada ligação (*bond*) vertical da interface e um buraco a cada ligação horizontal, como foi feito por exemplo em [141]. Uma outra possibilidade foi dada em [143, 144]. Neste caso, consideramos um conjunto de L partículas em uma rede unidimensional ocupando as posições x_ℓ , $1 \leq \ell \leq L$. Se associarmos aos índices ℓ das partículas uma coordenada horizontal, e às suas posições x_ℓ a altura de uma interface, temos um mapeamento um-a-um entre o conjunto de partículas e uma interface. Com a restrição adicional $x_{\ell+1} - x_\ell \geq 1$ nas posições das partículas, o modelo foi chamado de *particle-height model*. O modelo *particle-height* pode ser utilizado para mapear a dinâmica de uma interface de Ising em baixas temperaturas e o processo de exclusão simples (veja mais adiante como isso ocorre), muito embora a restrição nas posições das partículas pareça um pouco

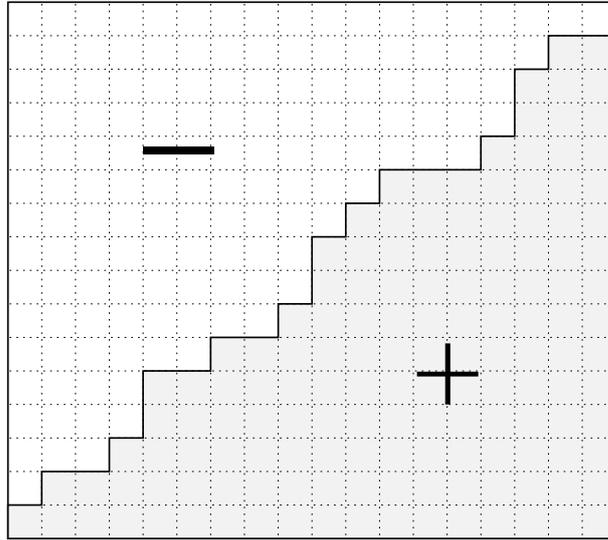


Figura 4.1: Interface do modelo de Ising do tipo “escada” separando as fases “+” e “-” do modelo. Neste caso, $L = 18$ e $N = 15$. Quando $B > 0$ ($B < 0$), a fase “+” (“-”) invade a fase “-” (“+”), enquanto para $B = 0$ a interface apenas flutua ao redor de sua posição inicial. Quando $\beta \rightarrow \infty$ e $|B| < 2J$ o número de ligações (*bonds*) na interface se conserva.

artificial no cenário de interfaces.

O modelo *particle-height* pode ser generalizado para processos nos quais a restrição nas posições das partículas é dada por $x_{\ell+1} - x_{\ell} \geq s \geq 0$, gerando um processo de exclusão no qual as partículas se movem somente se a partícula mais próxima estiver a uma distância de s sítios, pelo menos. Identificando uma partícula com o estado de spin para cima e um buraco com o estado de spin para baixo na base diagonal na matriz de Pauli σ^z , a evolução temporal dos processos de exclusão acima são governados pelo gerador infinitesimal [42, 164]

$$H_s = - \sum_{\ell=1}^L P_s \left[q \sigma_{\ell}^+ \sigma_{\ell+1}^- + p \sigma_{\ell}^- \sigma_{\ell+1}^+ + \frac{1}{4} (\sigma_{\ell}^z \sigma_{\ell+1}^z - 1) \right] P_s, \quad (4.6)$$

onde p e $q = 1-p$ são as taxas segundo as quais as partículas saltam respectivamente

para a direita e para a esquerda,

$$P_s = \prod_{\ell=1}^L \left[\frac{1}{2}(1 - \sigma_{\ell}^z) + \frac{1}{2}(1 + \sigma_{\ell}^z) \prod_{j=1}^{s-1} \frac{1}{2}(1 - \sigma_{\ell+j}^z) \right] \quad (4.7)$$

é o operador que projeta fora as configurações nas quais as partículas estão mais próximas que por s sítios, e $\sigma^{\pm} = \frac{1}{2}(\sigma^x \pm \sigma^y)$, σ^z são matrizes de Pauli, veja o Capítulo 3. Os geradores infinitesimais H_s são exatamente solúveis pelo *ansatz* de Bethe para qualquer escolha do inteiro $s \geq 0$ [42, 164]; para $s = 1$ recobramos o gerador infinitesimal do processo de exclusão simples usual [29, 149, 150].

Nosso mapeamento da interface de Ising para um conjunto de partículas na rede equivale ao mapeamento *particle-height* com $s = 0$. Seja $\Gamma_L^N = \{\gamma_L^N : |\gamma_L^N| = L + N\}$ o conjunto de todas as configurações γ_L^N do tipo “escada” de comprimento $|\gamma_L^N| = L + N$, $N \geq 0$, na rede infinita Λ_N de largura L com condições de contorno helicoidais $\mathbf{r} + L\mathbf{i} + N\mathbf{j} \equiv \mathbf{r}, \forall \mathbf{r} \in \Lambda_N$. A dinâmica das interfaces γ_L^N sob a ação das taxas $W(S_r)$ na eq. (4.5) no regime onde $\beta \gg 1$ e $B < 2J$ preserva o comprimento das interfaces, isto é, dada uma configuração inicial $\gamma_L^N(t = 0) \in \Gamma_L^N$, todas as configurações subsequentes $\gamma_L^N(t \geq 0) \in \Gamma_L^N$. O número de ligações verticais na interface portanto decompõe o espaço de fases Γ_L de possíveis configurações de interface em um número infinito de setores disjuntos, $\Gamma_L = \bigcup_{N \geq 0} \Gamma_L^N$. As configurações de interface γ_L^N podem ser tomadas como funções unívocas com relação à coordenada horizontal. Seja $h_{\ell} \in \mathbb{Z}$, $1 \leq \ell \leq L$ a altura de uma interface de Ising no sítio ℓ . Então as diferenças de alturas $n_{\ell} = h_{\ell+1} - h_{\ell}$ são números não negativos devido à forma especial de γ_L^N , e sua dinâmica se relaciona com a dinâmica da interface da seguinte maneira. Vamos considerar o caso $0 < B < 2J$, e que a fase “+” está abaixo da fase “-”, como na Figura 4.1. Cada spin “-” (“+”) que se reverte contribui para o crescimento da fase “+” (“-”), aumentando (diminuindo) a variável de altura associada com sua posição horizontal de uma unidade. As taxas com as quais os spins se revertem são dadas, de acordo com a eq. (4.5), por

$$- \rightarrow + : p = \frac{1}{1 + e^{-2\beta B}} \quad \text{e} \quad + \rightarrow - : q = \frac{1}{1 + e^{2\beta B}}; \quad (4.8)$$

obviamente $p + q = 1$. Quando $B = 0$, temos um sistema com invariância por reversão de todos os spins (simetria Z_2), que no caso dinâmico significa um sistema com invariância por reversão temporal, e a interface não se move como um todo, não cresce, apenas flutua em torno de sua posição inicial. Por outro lado, quando $0 < B < 2J$ e $\beta \rightarrow \infty$, $p = 1$, $q = 0$, e os spins “-” nunca se revertem, e neste caso a superfície só pode crescer. Obtemos a situação geral $0 < q < p < 1$ quando $\beta \rightarrow \infty$ e $B \rightarrow 0$ tal que $\beta B = \text{constante}$. Os movimentos associados às diferenças nas alturas correspondentes às reversões de spin acima são $(n_{\ell-1}, n_{\ell}) \rightarrow (n_{\ell-1} - 1, n_{\ell} + 1)$ quando $h_{\ell} \rightarrow h_{\ell} + 1$, e $(n_{\ell-1}, n_{\ell}) \rightarrow (n_{\ell-1} + 1, n_{\ell} - 1)$ quando $h_{\ell} \rightarrow h_{\ell} - 1$. A diferença máxima de alturas em Λ_N é $n_{\ell} = N$, caso em que $h_1 = h_2 = \dots = h_{\ell} = 0$ e $h_{\ell+1} = h_{\ell+2} = \dots = h_L = N$. Mais geralmente, temos que $\sum_{\ell=1}^{L-1} n_{\ell} = h_L - h_1 = N$. Pode-se agora apreciar o papel das condições de contorno helicoidais que adotamos para Λ_N : o passo N fornece o número total de partículas interagentes no cenário de diferenças de alturas. As condições de contorno neste cenário são simplesmente periódicas.

A dinâmica das variáveis n_{ℓ} nada mais é que a do processo *zero range* [156, 157, 158, 159, 160], na qual partículas saltam em uma rede unidimensional sem sofrerem exclusão. Exceto pelos valores absolutos das alturas, que dependem do conhecimento do valor absoluto de uma das alturas (digamos h_1), a dinâmica das variáveis n_{ℓ} contém toda a informação sobre a interface de Ising. Os processos elementares para as variáveis n_{ℓ} são dados por

$$(n_{\ell-1} + 1, n_{\ell}) \xrightleftharpoons[q]{p} (n_{\ell-1}, n_{\ell} + 1), \quad 0 \leq n_{\ell-1}, n_{\ell} \leq N, \quad 1 \leq \ell \leq L. \quad (4.9)$$

O gerador infinitesimal do processo *zero range* acima é dado por

$$H_N = \sum_{\ell=1}^L \sum_{0 \leq m+n \leq N} \left[p \left(E_{\ell}^{m+1, m+1} E_{\ell+1}^{n, n} - E_{\ell}^{m, m+1} E_{\ell+1}^{n+1, n} \right) + q \left(E_{\ell}^{m, m} E_{\ell+1}^{n+1, n+1} - E_{\ell}^{m+1, m} E_{\ell+1}^{n, n+1} \right) \right], \quad (4.10)$$

onde $E^{m, n}$ são as matrizes de Weyl introduzidas no Capítulo 2. Vamos diagonalizar este operador na próxima seção.

4.4 O ansatz de Bethe

4.4.1 Resolução do autoespectro

Estamos interessados nas soluções do problema de autovalores

$$H_N|\Psi_N\rangle = E_N|\Psi_N\rangle, \quad (4.11)$$

onde H_N é o operador dado em (4.10), e

$$|\Psi_N\rangle = \sum_{x_1 \leq x_2 \leq \dots \leq x_N} \Phi(x_1, x_2, \dots, x_N) |x_1, x_2, \dots, x_N\rangle \quad (4.12)$$

é a autofunção escrita na base que especifica as posições das N partículas no sistema, com $\Phi(x_1, x_2, \dots, x_N)$ o coeficiente para a configuração $|x_1, x_2, \dots, x_N\rangle$. Repare que as posições x_1, x_2, \dots, x_N podem coincidir, já que não há exclusão entre as partículas.

Ao invés de tentar resolver a eq. (4.11) no caso geral para um número arbitrário N de partículas, vamos primeiro tentar resolvê-la no setor de uma partícula, depois no setor de duas partículas, e então tentar adivinhar a solução geral. Quando temos apenas uma partícula no sistema, escrevemos

$$|\Psi_1\rangle = \sum_{x_1=1}^L \Phi(x_1) |x_1\rangle, \quad \Phi(x_1) = e^{ik_1 x_1} \quad (4.13)$$

e imediatamente obtemos o autovalor

$$E_1(k_1) = \varepsilon(k_1) \equiv 1 - pe^{-ik_1} - qe^{ik_1}, \quad (4.14)$$

onde definimos a “energia” de uma partícula $\varepsilon(k)$, e condições periódicas de contorno $\Phi(x_1 + L) = \Phi(x_1)$ implicam $k_1 = 2\pi\ell/L$, $0 \leq \ell \leq L - 1$. Este é um caso bastante simples. Vamos agora olhar para o setor de duas partículas. Neste setor, temos de distinguir os casos em que as duas partículas x_1 e x_2 ocupam o mesmo sítio ou não. Quando $x_2 > x_1$, a equação de autovalor (4.11) para os coeficientes

$\Phi(x_1, x_2)$ se torna

$$\begin{aligned} E_2\Phi(x_1, x_2) = & -p\Phi(x_1 - 1, x_2) - q\Phi(x_1 + 1, x_2) + \Phi(x_1, x_2) \\ & -p\Phi(x_1, x_2 - 1) - q\Phi(x_1, x_2 + 1) + \Phi(x_1, x_2). \end{aligned} \quad (4.15)$$

Esta equação pode ser resolvida pelo *ansatz*

$$\Phi(x_1, x_2) = e^{ik_1x_1} e^{ik_2x_2}, \quad (4.16)$$

resultando no autovalor

$$E_2(k_1, k_2) = \varepsilon(k_1) + \varepsilon(k_2). \quad (4.17)$$

Vemos então que quando as duas partículas estão longe uma da outra, em nosso caso apenas não no mesmo sítio, elas se comportam como se estivessem livres, e a “energia” total do sistema é a soma das “energias” de duas partículas. Uma vez que este autovalor é simétrico em k_1 e k_2 , podemos escrever a solução mais geral da eq. (4.15) na forma

$$\Phi(x_1, x_2) = A_{12}e^{ik_1x_1} e^{ik_2x_2} + A_{21}e^{ik_2x_1} e^{ik_1x_2}, \quad (4.18)$$

que se pode ver facilmente que é uma solução da eq. (4.15) com o mesmo autovalor (4.17). Agora vem a segunda condição a ser satisfeita por $\Phi(x_1, x_2)$. Quando as duas partículas estão no mesmo sítio, a equação de autovalores (4.11) fica

$$E_2\Phi(x_1, x_2) = -p\Phi(x_1 - 1, x_1) - q\Phi(x_1, x_1 + 1) + \Phi(x_1, x_1). \quad (4.19)$$

Substituindo o coeficiente (4.18) junto do autovalor (4.17) obtido previamente na equação acima obtemos a seguinte condição para as amplitudes A_{12} e A_{21} ,

$$\frac{A_{12}}{A_{21}} = -\frac{e^{ik_2}}{e^{ik_1}} e^{i\Theta_{12}}, \quad (4.20)$$

onde a “fase de espalhamento de duas partículas” (*two-particle scattering phase*)

$\Theta_{j\ell}$ é definida por

$$e^{i\Theta_{j\ell}} = \frac{p + qe^{i(k_j+k_\ell)} - e^{ik_j}}{p + qe^{i(k_j+k_\ell)} - e^{ik_\ell}}. \quad (4.21)$$

Observamos de passagem que uma vez que o gerador infinitesimal (4.10) não é hermitiano, os “números de onda” k são em geral números complexos. Fixamos esses “números de onda” através das condições de contorno

$$\Phi(x_2, x_1 + L) = \Phi(x_1, x_2), \quad (4.22)$$

que fornecem para as amplitudes A_{12} e A_{21} as relações

$$A_{12} = e^{ik_1L}A_{21} \quad \text{e} \quad A_{21} = e^{ik_2L}A_{12}. \quad (4.23)$$

As equações (4.20), (4.21), e (4.23) fornecem para os “números de onda” k_j no setor de duas partículas as equações

$$e^{ik_jL} = (-1) \prod_{\ell=1}^2 \left(\frac{e^{ik_\ell}}{e^{ik_j}} \right) e^{i\Theta_{j\ell}} = (-1) \prod_{\ell=1}^2 \left(\frac{e^{ik_\ell}}{e^{ik_j}} \right) \frac{p + qe^{i(k_j+k_\ell)} - e^{ik_j}}{p + qe^{i(k_j+k_\ell)} - e^{ik_\ell}}, \quad 1 \leq j \leq 2, \quad (4.24)$$

com autovalores dados pela eq. (4.17).

Estamos agora em condições de tratar o problema de N partículas. Se as posições das partículas satisfazem $x_{j+1} > x_j$, $1 \leq j \leq N$, vemos facilmente que o sistema é equivalente a um sistema de N partículas livres, e a equação de autovalor (4.11) é satisfeita pela autofunção (4.12) com coeficientes

$$\Phi(x_1, x_2, \dots, x_N) = \sum_P A_{P(1)P(2)\dots P(N)} \exp \left[i \sum_{j=1}^N k_{P(j)} x_j \right] \quad (4.25)$$

com o autovalor

$$E_N(k_1, k_2, \dots, k_N) = \sum_{j=1}^N \varepsilon(k_j), \quad (4.26)$$

onde a soma na eq. (4.25) se estende sobre todas as $N!$ permutações P dos índices

$(1, 2, \dots, N)$ usados para rotular as posições das partículas, e os “números de onda” k_1, k_2, \dots, k_N são escolhidos de tal forma que $|\Psi_N\rangle$ satisfaça a eq. (4.11). Este é o famoso *ansatz* de Bethe. Quando um par de partículas se encontra no mesmo sítio, $x_{j+1} = x_j$, obtemos das Eqs. (4.11), (4.25) e (4.26) que as amplitudes $A_{P(1)P(2)\dots P(N)}$ devem satisfazer

$$\frac{A_{P(1)P(2)\dots P(j)P(j+1)\dots P(N)}}{A_{P(1)P(2)\dots P(j+1)P(j)\dots P(N)}} = -\frac{e^{ik_{P(j+1)}}}{e^{ik_{P(j)}}} e^{i\Theta_{P(j)P(j+1)}}. \quad (4.27)$$

As condições de contorno

$$\Phi(x_2, x_3, \dots, x_1 + L) = \Phi(x_1, x_2, \dots, x_N) \quad (4.28)$$

fornecem as relações adicionais

$$A_{P(1)P(2)\dots P(N)} = e^{ik_{P(1)}L} A_{P(2)P(3)\dots P(1)}. \quad (4.29)$$

Iterando as relações (4.27) N vezes, a eq. (4.29) nos fornece as equações do *ansatz* de Bethe para os “números de onda” k_j no setor de N partículas,

$$e^{ik_j L} = (-1)^{N-1} \prod_{\ell=1}^N \left(\frac{e^{ik_\ell}}{e^{ik_j}} \right) e^{i\Theta_{j\ell}} = (-1)^{N-1} \prod_{\ell=1}^N \left(\frac{e^{ik_\ell}}{e^{ik_j}} \right) \frac{p + qe^{i(k_j+k_\ell)} - e^{ik_j}}{p + qe^{i(k_j+k_\ell)} - e^{ik_\ell}}, \quad 1 \leq j \leq N. \quad (4.30)$$

As soluções k_1, k_2, \dots, k_N destas equações fornecem através da eq. (4.26) os autovalores do operador (4.10).

As autofunções (4.12) com os coeficientes (4.25) são também autofunções do operador de translação T que desloca as posições das partículas para a esquerda de uma posição, $T|x_1, x_2, \dots, x_N\rangle = |x_1 - 1, x_2 - 1, \dots, x_N - 1\rangle$, uma vez que $[H, T] = 0$. Os autovalores e^{iP} de T são dados por

$$T|\Psi_N\rangle = e^{iP}|\Psi_N\rangle = \left[\prod_{j=1}^N e^{ik_j} \right] |\Psi_N\rangle, \quad (4.31)$$

onde definimos o momento total P como

$$P = \sum_{j=1}^N k_j \pmod{2\pi} = \frac{2\pi\ell}{L}, \quad 0 \leq \ell \leq L-1. \quad (4.32)$$

As Eqs. (4.30) têm uma interpretação interessante. Com a definição de P acima, vemos que as Eqs. (4.30) podem ser reescritas na forma

$$e^{ik_j(L+N)} = (-1)^{N-1} e^{i \sum_{\ell=1}^N k_\ell} \prod_{\ell=1}^N e^{i\Theta_{j\ell}} = (-1)^{N-1} e^{iP} \prod_{\ell=1}^N \frac{p + qe^{i(k_j+k_\ell)} - e^{ik_j}}{p + qe^{i(k_j+k_\ell)} - e^{ik_\ell}}, \quad 1 \leq j \leq N. \quad (4.33)$$

Podemos reconhecer nas equações acima as equações do *ansatz* de Bethe para o processo de exclusão simples assimétrico de N partículas em uma rede de $L + N$ sítios [29, 150] com condições de contorno torcidas (*twisted*) [165], com o ângulo de torção dado pelo momento total P do sistema. Para processos estocásticos o único setor de momento relevante é o setor de momento nulo $P = 0$, já que os coeficientes $\Phi(x_1, x_2, \dots, x_N)$ têm de ser todos reais e positivos, e neste setor a analogia com o processo de exclusão simples é perfeita.

Completamos assim a diagonalização do gerador infinitesimal do processo em que N partículas difundem em uma rede unidimensional de L sítios sem sofrerem exclusão. Nossa maior tarefa agora é resolver as equações do *ansatz* de Bethe (4.30), usualmente feita numericamente. Neste caso, porém, pode-se atacar essas equações de forma analítica, como segue.

4.4.2 O expoente crítico dinâmico

O expoente crítico dinâmico z está relacionado com o *gap* espectral em sistemas finitos de acordo com $\text{Re}\{E_N^{(1)}(L)\} \sim L^{-z}$, onde agora indicamos a dependência de $E_N^{(1)}$ com o tamanho L do sistema; veja o Capítulo 2. A fim de calcular z a partir das equações de Bethe (4.30), devemos portanto calcular as correções de tamanho finito ao segundo autovalor (o “primeiro estado excitado”) do conjunto de autovalores $E_N(L)$ na eq. (4.26). Este cálculo, além de ser puramente técnico, já foi feito em

grande detalhe para o caso do processo de exclusão assimétrico [29, 150], e também para alguns modelos correlatos [42, 161], de forma que aqui apenas o esboçamos.

Simulações numéricas extensivas, junto de argumentos teóricos e cálculos explícitos [29, 137, 150, 152] indicam que o valor de z não depende dos valores particulares de p e q (ou melhor, de p/q) desde que $p \neq q$, isto é, basta distinguir entre os casos simétrico e assimétrico. Vamos portanto nos restringir ao caso em que $p = 1$ e $q = 0$, uma vez que neste caso a análise das equações de Bethe se torna muito mais fácil. Um método para se estudar o caso mais geral de $p \neq 0 \neq q$ pode ser encontrado em [150]. Como já dissemos, no cenário de interfaces o caso $p = 1$, $q = 0$ significa que estamos investigando as flutuações críticas de uma interface de Ising em um campo externo mas a temperatura nula. Simulações numéricas, no entanto, indicam que pelo menos para temperaturas baixas (mas não nulas), o comportamento crítico observado é o mesmo que no caso de temperaturas nulas [166].

Vamos definir os “números de onda deslocados” z_j por

$$z_j = 2e^{-ik_j} - 1, \quad 1 \leq j \leq N. \quad (4.34)$$

Os autovalores $E_N(L)$ e e^{iP} nas Eqs. (4.30) e (4.31) com $p = 1$, $q = 0$ em termos das novas variáveis z_j ficam

$$E_N(L) = \sum_{j=1}^N \frac{1}{2}(1 - z_j) \quad \text{e} \quad e^{iP} = \prod_{j=1}^N \frac{1}{2}(1 + z_j), \quad (4.35)$$

enquanto as equações de Bethe (4.30) se tornam

$$(1 + z_j)^L (1 - z_j)^N = 2^L (-1)^{N-1} \prod_{\ell=1}^N (1 - z_\ell), \quad 1 \leq j \leq N. \quad (4.36)$$

Este conjunto de equações pode ser simplificado mais ainda se considerarmos o setor no qual $N = L$, isto é, o setor no qual em média temos uma partícula por sítio, ou, no cenário de interfaces, uma interface com inclinação média de 45° . Neste

setor, e tomando L par por conveniência, obtemos

$$(1 - z_j^2)^N = -2^N \prod_{\ell=1}^N (1 - z_\ell), \quad 1 \leq j \leq N. \quad (4.37)$$

A escolha $N = L$ é análoga à escolha de um setor “meio-cheio” (*half-filled*) $2N = L$ para o processo de exclusão simples [29]. Na verdade, pode-se mostrar que para um $s \geq 0$ arbitrário na eq. (4.6), a escolha $(1 + s)N = L$ fornece equações semelhantes às que obtemos aqui [42].

O lado direito da eq. (4.37) é independente do índice j (daí nossa escolha de $N = L$), e seguindo a referência [29] parametrizamos o lado direito daquela equação por duas variáveis a e θ de acordo com

$$-a^N e^{iN\theta} = -2^N \prod_{\ell=1}^N (1 - z_\ell), \quad (4.38)$$

onde $a \geq 0$ e $\theta \in [-\pi/N, \pi/N)$. As $2N$ raízes das equações de Bethe (4.37) são dadas em termos das N raízes de $Y(a, \theta)$ por

$$z_j = \sqrt{1 - y_j}, \quad z_{j+N} = -z_j, \quad 1 \leq j \leq N, \quad (4.39)$$

onde

$$y_j = a e^{i\theta} e^{2\pi i(j-\frac{1}{2})/N}, \quad 1 \leq j \leq N. \quad (4.40)$$

Para uma dada escolha das raízes z_j , as duas incógnitas a e θ são fixadas pela eq. (4.38).

Nossa tarefa é encontrar o autovalor $E_N^{(1)}(L)$ mais próximo do autovalor $E_N^{(0)}(L) = 0$ correspondente ao estado estacionário, que é obtido escolhendo todas as raízes $z_j = 1$, isto é, colocando todos os $y_j = 0$, o que implica $a = 0$ e $\theta = 0$ na eq. (4.38). O estado estacionário também possui $P = 0$. Das Eqs. (4.35) vemos que cada par z_j, z_{j+N} contribui um fator unitário para a “energia”, uma vez que $z_j + z_{j+N} = 0$. Estados de autovalor mais baixo são portanto obtidos escolhendo-se um conjunto de N raízes com o menor número possível de pares z_j, z_{j+N} , e vamos olhar para os

conjuntos $Z_+ = \{z_1, z_2, \dots, z_{N-1}, z_{N+1}\}$ e $Z_- = \{z_2, z_3, \dots, z_N, z_{2N}\}$, que têm momentos $P = \mp 2\pi/N$, respectivamente. Uma análise análoga àquela feita em [29] revela que de fato estes conjuntos de raízes fornecem os autovalores mais baixos, com o resultado que o *gap* se comporta assintoticamente como

$$E_N^{(1)}(L) \sim 2.301\,345 \dots L^{-3/2} - i\frac{\pi}{2}L^{-1}, \quad (4.41)$$

enquanto a amplitude a e a fase θ na eq. (4.38) se comportam como

$$a = 1 + \alpha L^{-1} + o(L^{-1}), \quad \theta = \pm\beta L^{-3/2} + o(L^{-3/2}), \quad (4.42)$$

com α e β duas constantes. Os detalhes das contas acima, incluindo uma bela aplicação da fórmula de Abel-Plana [167], podem ser encontrados em [29, 150], enquanto alguns resultados pertinentes ao caso de um H_s geral na eq. (4.6) apareceram em [42].

Vemos da eq. (4.41) que o expoente crítico dinâmico z do processo *zero range* totalmente assimétrico é dado por $z = \frac{3}{2}$, indicando que este processo pertence à classe de universalidade de comportamento crítico de Kardar-Parisi-Zhang [39].

4.5 Conclusões e perspectivas

Neste capítulo mostramos como se pode mapear a dinâmica de interfaces de um modelo de Ising estocástico bidimensional a baixas temperaturas e campos externos fracos em um modelo de partículas interagentes exatamente solúvel pelo *ansatz* de Bethe. O modelo resultante nada mais é que o processo conhecido como *zero range*, no qual partículas difundem em uma rede unidimensional sem sofrerem exclusão. A análise das equações de Bethe revelam que o *gap* espectral da versão assimétrica do processo *zero range*, correspondendo ao caso em que o campo externo no modelo de Ising é não nulo, escala com o tamanho L do sistema como $L^{-3/2}$. Este fato se traduz no problema de interface do modelo de Ising dizendo que na presença de um campo externo a superfície cresce e se enruga dinamicamente com os expoentes da classe de universalidade de Kardar-Parisi-Zhang.

Seria interessante explorar o mapeamento do problema de interface do modelo de Ising e o processo *zero range* mais um pouco e tentar determinar as funções de correlação degrau-degrau da interface usando partículas marcadas (*tagged particles*) no processo *zero range* [143, 144, 145, 153, 154, 155, 158, 159, 160]. Estamos no momento investigando essa possibilidade [168].

Conclusões e perspectivas

Neste capítulo apresentamos conclusões de caráter geral e traçamos algumas perspectivas com relação aos assuntos investigados nesta tese.

5.1 Conclusões

Nesta tese efetuamos a investigação de alguns sistemas de partículas interagentes fora do equilíbrio através de técnicas de diagonalização numérica e idéias de *finite-size scaling*. Também investigamos um modelo exatamente solúvel relacionado ao modelo de Ising através do *ansatz* de Bethe. As conclusões específicas relativas a cada um dos problemas que atacamos podem ser encontradas ao final dos respectivos capítulos, e não vamos reproduzi-las aqui.

Por um lado, técnicas de diagonalização numérica são extremamente poderosas, uma vez que ao efetuarmos a resolução espectral do operador de evolução temporal H de um problema estamos de fato resolvendo exatamente a equação mestra do processo, e temos acesso às suas propriedades exatas em sistemas finitos. As idéias de *finite-size scaling* então nos ajudam a extrapolar o que observamos nos sistemas finitos para o limite de um sistema infinito. Por outro lado, essas mesmas técnicas são difíceis de se aplicar (em comparação com simulações diretas de Monte Carlo), e os resultados obtidos nem sempre são animadores. Aparentemente as dificuldades numéricas encontradas podem ser atribuídas à não hermiticidade dos operadores de processos fora do equilíbrio (sem balanceamento detalhado). Como é bem sabido na literatura de álgebra linear computacional [82, 124], o tratamento de problemas não simétricos está longe de ser um assunto bem estabelecido, uma vez

que toda sorte de “patologias” que não ocorrem em problemas simétricos podem vir a ocorrer quando tratamos de problemas não simétricos. Como ressaltamos no Apêndice A, a menos que lancemos mão de algoritmos bastante custosos em termos de tempo e memória (que no entanto vêm barateando a cada dia), não se pode nem mesmo garantir a estabilidade dos métodos utilizados. Recentemente, o algoritmo de grupo de renormalização por matriz densidade (*density matrix renormalization group*, DMRG) [169], surgido no contexto do magnetismo, passou a ser utilizado em sistemas de partículas fora do equilíbrio, mas os resultados por enquanto não são muito bons [170, 171]. Provavelmente isto se deve a duas características do algoritmo de DMRG que não fazem dele um bom método no estudo de fenômenos críticos: primeiro, ele funciona melhor com condições de contorno abertas, o que próximo ao ponto crítico amplifica efeitos indesejados de tamanho finito, e segundo, ele funciona melhor para sistemas com *gap*, e na investigação de transições de fases estamos justamente procurando pontos no espaço de parâmetros nos quais o sistema “fecha” o *gap*. Se ele é ruim no cálculo de expoentes críticos, por outro lado ele é excelente no cálculo de funções de correlação, como foi demonstrado em [170]. Teria sido uma boa idéia, por exemplo, calcular o parâmetro de ordem de *string* do modelo apresentado no Capítulo 2 usando o DMRG.

A técnica que desenvolvemos Capítulo 3 para estudar propriedades dependentes do tempo usando o gerador infinitesimal do processo parece nunca ter sido explorada em física antes de nosso trabalho. Uma tentativa anterior parecida com nossa abordagem apareceu em [122], mas ali a determinação da escala de tempo microscópica foi feita *ad hoc*, por tentativa e erro [172]. Nossa abordagem, que não é nova, conforme ressaltamos no Capítulo 3, pode representar algum avanço na tentativa de se utilizar o formalismo de matrizes na investigação de propriedades dependentes do tempo em processos estocásticos com estados absorventes. O problema aqui é a concorrência, uma vez que neste ramo simulações diretas de Monte Carlo são muito mais eficientes, e no cálculo de expoentes críticos relacionados a grandezas dependentes do tempo fornece resultados muito mais precisos, veja por exemplo [109, 128, 129, 132].

A aplicação do *ansatz* de Bethe à resolução do autoespectro de operadores

estocásticos é hoje uma área bem estabelecida da física matemática, e conta com uma literatura bastante grande, veja por exemplo as referências dadas no Capítulo 4. Apesar da aparente simplicidade dos cálculos apresentados naquele capítulo, essa é uma área bastante técnica, pelo seguinte motivo: como saber se um dado operador de evolução é exatamente solúvel pelo *ansatz* de Bethe? Esta decisão envolve a verificação das relações de Yang-Baxter para a matriz de pesos de Boltzmann associada ao modelo de vértices subjacente ao sistema de partículas [24, 173], modelo esse que por si só já pode ser difícil de encontrar, ou equivalentemente das relações de fatorização para a matriz S para as amplitudes de espalhamento associada aos processos elementares, aparentemente mais fácil de ser verificada no caso de sistemas de partículas interagentes. Uma outra dificuldade associada ao *ansatz* de Bethe é que ele fornece o autoespectro do operador de evolução de forma relativamente imediata, e portanto o diagrama de fases do modelo, mas o cálculo de funções de correlação (fora do equilíbrio ou não) a partir do *ansatz* de Bethe é uma tarefa muito difícil, se não impossível, na maior parte dos casos.

5.2 Perspectivas

5.2.1 Processos de contato com conservação de paridade

Recentemente percebeu-se que nem todas as transições de fase envolvendo estados absorventes pertencem à classe de universalidade da percolação orientada. Exemplos de modelos que exibem comportamento crítico diferente do da percolação orientada vão de autômatos celulares probabilísticos e modelos de Ising cinéticos em duas temperaturas a modelos de interação entre monômeros e dímeros na rede, passeios aleatórios com criação e aniquilação de partículas, e processos de contato com conservação de paridade do número de partículas; para uma revisão veja [128, 132, 174]. O que há de comum entre estes modelos é que em todos eles as taxas de transição microscópicas são tais que o número total de partículas N no sistema conserva sua paridade, isto é, $N \bmod 2$ é uma grandeza conservada. Aqui o termo partícula deve ser entendido no sentido mais geral de partículas interagentes, podendo ser partículas mesmo ou paredes de domínio em alguns modelos; isto no

princípio causou alguma confusão. A nova classe de universalidade de comportamento crítico que surgiu passou a ser conhecida como classe de universalidade da conservação da paridade. Surgiram porém alguns modelos que, embora suas taxas de reação conservem paridade, apresentam comportamento crítico na classe de universalidade da percolação orientada [175, 176]. A explicação corrente para este fato é a de que não é somente a conservação da paridade que determina a classe de universalidade à qual o comportamento crítico de determinado modelo pertence, mas também o número de estados estacionários equivalentes no modelo.

Pretendemos investigar alguns aspectos relacionados à classe de universalidade da conservação da paridade usando para isso os processos de contato com conservação de paridade primeiramente introduzidos em [177], utilizando as mesmas técnicas que desenvolvemos no estudo do processo de contato básico, veja o Capítulo 2. Nestes processos, um conjunto de m indivíduos saudáveis \emptyset rodeados de k indivíduos infectados X se torna infectado a uma taxa $k\lambda$, enquanto m indivíduos infectados se recobram espontaneamente à taxa unitária. Chamamos estes processos de $CP(m)$; o caso $m = 1$ se reduz ao processo de contato básico usual. Em uma dimensão, podemos visualizar o $CP(2)$ como $X\emptyset\emptyset \xrightarrow{\lambda} XXX\emptyset$, $\emptyset\emptyset\emptyset X \xrightarrow{\lambda} \emptyset XXX$, $X\emptyset\emptyset X \xrightarrow{2\lambda} XXXX$, e $XX \xrightarrow{1} \emptyset\emptyset$, e analogamente para $m > 2$. Destas reações podemos ver que os processos $CP(m)$ conservam a m -paridade do número total de partículas.

Os processos $CP(m)$ apresentam muitas propriedades interessantes. A primeira delas se refere ao número de estados absorventes do processo. Enquanto para o processo de contato básico ($m = 1$) existe um único estado absorvente dado pela rede completamente vazia, para valores de $m \geq 2$ o número de estados absorventes aumenta. Por exemplo, para $m = 2$ temos que, além da rede completamente vazia $|\mathbf{0}\rangle = |0, 0, \dots, 0\rangle$, as configurações $|\emptyset, X, \emptyset, X, \dots, \emptyset, X\rangle$ e $|X, \emptyset, X, \emptyset, \dots, X, \emptyset\rangle$ também são absorventes. É claro que sob condições de contorno periódicas estes dois estados são o mesmo; vamos denotá-lo por $|\tilde{\mathbf{0}}\rangle$. Este estado pertence ou não ao espaço de configurações acessíveis à dinâmica de acordo com as paridades do tamanho L da rede e de $N \bmod 2$: se L é ímpar, então o único estado absorvente do processo é $|\mathbf{0}\rangle$, uma vez que é impossível preencher a rede com uma repetição

de $\emptyset X$'s apenas. Para uma rede par, o estado $|\tilde{0}\rangle$ contém $L/2$ partículas, e este número tem de ser compatível com a paridade de $N \bmod 2$: se $L = 4k$, com $k \in \mathbb{N}$, e $N \bmod 2 = 0$, então $|\tilde{0}\rangle$ é um estado absorvente do processo; já se $L = 4k + 2$, então $|\tilde{0}\rangle$ é um estado absorvente somente se $N \bmod 2 = 1$. Desta discussão podemos ver que o número dos subespaços invariantes dos processos deve crescer com m , uma vez que quanto maior o valor de m , mais fácil fica de encontrar estados para os quais nenhuma evolução é possível. Estes estados são ditos estados congestionados, e foram bastante estudados no contexto de processos de adsorção e dessorção de m -meros na rede [178]. Na verdade, pode-se provar que o número $I_L(m)$ de estados absorventes para o processo $CP(m)$ em uma rede unidimensional de L sítios é dado por $I_L(m) \sim 2\phi^L$, onde ϕ é a maior raiz da equação $\phi^m = 2\phi^{m-1} - 1$. Para $m = 3$ temos $\phi = (1 + \sqrt{5})/2 \simeq 1.61803$, a famosa razão dourada (*golden mean*) relacionada aos números de Fibonacci, enquanto para $m = 4$, $\phi \simeq 1.83929$. O fato do número de estados absorventes crescer exponencialmente com m torna o comportamento crítico destes modelos bastante interessante, uma vez que eles tendem a apresentar uma diversidade dinâmica muito grande, com expoentes que variam continuamente, como no processo de contato de pares [128], e com violações às relações de escala em determinados subespaços. Na verdade, acreditamos que este fato pode ter mascarado uma transição de fases esperada para o processo $CP(3)$, conforme resultados de simulações de Monte Carlo [177]. Seria interessante demonstrar rigorosamente a existência ou não de transições de fases para a classe de modelos $CP(m \geq 2)$.

Outra característica importante dos processos $CP(m)$ é o fato de que a adição de difusão simples $\emptyset X \rightleftharpoons X\emptyset$ ao processo deve modificar a classe de universalidade de seu comportamento crítico. Como se sabe [179], para o processo de contato básico a difusão representa uma perturbação irrelevante (desde que a constante de difusão permaneça finita). Para valores de $m \geq 2$, no entanto, adicionar difusão ao processo significa interligar regiões desconexas do espaço de fases, reduzindo o número de estados estacionários do processo de um número exponencialmente grande a m . O estudo dos efeitos da difusão sobre o comportamento crítico dos processos $CP(m)$ viria então adicionar evidências, a favor ou contra, à conjectura atual que diz que a classe de universalidade de comportamento crítico de transições

de fase envolvendo estados absorventes depende não das simetrias envolvidas no processo, como se poderia esperar a partir de nosso conhecimento da mecânica estatística de equilíbrio, mas sim do número de estados absorventes equivalentes envolvidos na transição [175, 176]. Investigações nestas direções se encontram em andamento [180].

5.2.2 O processo zero range

Pretendemos nos dedicar ao estudo analítico dos processos de difusão assimétrica sem exclusão conhecidos como processos *zero range*, apresentados no Capítulo 3 desta tese em conexão com a dinâmica de interfaces do modelo de Ising estocástico bidimensional. Em particular, pretendemos investigar o comportamento de partículas marcadas (*tagged particles*) sob a dinâmica deste processo. Apesar de sua aparente simplicidade, o processo *zero range* apresenta um comportamento dinâmico muito interessante para algumas classes de condições iniciais, e muitos resultados gerais na área de sistemas de partículas interagentes foram obtidos utilizando-se o processo *zero range* como modelo, como a obtenção de limites hidrodinâmicos [181]. Pretendemos efetuar estes estudos utilizando o *ansatz* de Bethe, como recentemente proposto para toda uma classe de processos estocásticos envolvendo partículas de tamanhos diferentes [42], e também de tipos diferentes [182]. Este estudo envolve o que se conhece como *ansatz* de Bethe *nested*, uma versão razoavelmente mais complicada do *ansatz* de Bethe simples apresentado no Capítulo 3. Pretendemos também investigar o comportamento de uma partícula de “segunda classe” sob a dinâmica do processo.

Para os processos de exclusão generalizados citados acima, seria interessante calcular as probabilidades condicionais $P(x_1, x_2, \dots, x_N; t | y_1, y_2, \dots, y_N; 0)$ de observar as partículas nas posições x_1, x_2, \dots, x_N no instante $t \geq 0$ dado que elas ocupavam as posições y_1, y_2, \dots, y_N no instante $t = 0$, já que no caso completamente assimétrico essas probabilidades podem ser obtidas como soluções determinantis da equação mestra [183, 184].

As perspectivas traçadas acima constituem parte do projeto de pesquisa do autor para o futuro imediato.

A

Métodos de projeção em subespaços de Krylov

Todos os métodos iterativos de projeção em subespaços para a determinação de alguns poucos autovalores e autovetores de uma matriz H podem ser vistos como variantes do método da potência. Vamos portanto primeiro descrever este método.

Usamos a notação de *bra-ket* de Dirac para vetores. Seja uma matriz H qualquer de ordem N que possui em seu autoespectro um autovalor simples de maior módulo,

$$|\lambda_1| > |\lambda_\ell| \quad \forall \ell > 1, \quad (\text{A.1})$$

associado ao autovetor normalizado $|\psi_1\rangle$,

$$H|\psi_1\rangle = \lambda_1|\psi_1\rangle. \quad (\text{A.2})$$

Se estivermos interessados no autopar $\{\lambda_1, |\psi_1\rangle\}$, podemos determiná-lo da seguinte forma. Começando com um vetor qualquer $|\phi_1\rangle$, formamos a sequência

$$|\phi_{k+1}\rangle = H|\phi_k\rangle = H^k|\phi_1\rangle \quad (\text{A.3})$$

e enunciamos o seguinte teorema: dada a condição (A.1) e um vetor $|\phi_1\rangle$ tal que $\langle\psi_1|\phi_1\rangle \neq 0$, a sequência (A.3) converge para $\lambda_1^k \langle\psi_1|\phi_1\rangle |\psi_1\rangle$ conforme $k \rightarrow \infty$. A demonstração é muito simples. Seja $\{|\psi_\ell\rangle\}_{\ell=1}^N$ o conjunto de autovetores normalizados de H , e escrevamos¹

$$|\phi_1\rangle = f_1|\psi_1\rangle + f_2|\psi_2\rangle + \dots + f_N|\psi_N\rangle. \quad (\text{A.4})$$

¹Vamos assumir que $\{|\psi_\ell\rangle\}_{\ell=1}^N$ é completo, embora este ponto não seja essencial para a discussão do método da potência. Uma discussão do método sob hipóteses variadas pode ser encontrada em [185].

Daí

$$\begin{aligned} |\phi_k\rangle &= f_1 \lambda_1^k |\psi_1\rangle + f_2 \lambda_2^k |\psi_2\rangle + \dots + f_N \lambda_N^k |\psi_N\rangle \\ &= \lambda_1^k \left[f_1 |\psi_1\rangle + f_2 \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^k |\psi_2\rangle + \dots + f_N \left(\frac{\lambda_N}{\lambda_1}\right)^k |\psi_N\rangle \right], \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

e como temos $|\lambda_\ell/\lambda_1| < 1$ por hipótese, segue $\lim_{k \rightarrow \infty} H^k |\phi_1\rangle = \lambda_1^k \langle \psi_1 | \phi_1 \rangle |\psi_1\rangle$. A taxa de convergência do método da potência é ditada pelo maior valor de $|\lambda_\ell/\lambda_1| < 1$.

Na prática, usamos os chamados quocientes de Rayleigh dados por

$$\frac{R_{2k+1}}{R_{2k}} = \frac{\langle \phi_k | \phi_{k+1} \rangle}{\langle \phi_k | \phi_k \rangle} = \frac{\langle \phi_k | H | \phi_k \rangle}{\langle \phi_k | \phi_k \rangle} \quad (\text{A.6})$$

na determinação de λ_1 , pois como se pode ver facilmente, $\lim_{k \rightarrow \infty} R_{2k+1}/R_{2k} = \lambda_1$.

Se o maior autovalor de H tem uma multiplicidade geométrica g , o vetor iterado $|\phi_1\rangle$ se torna com as iterações mais proporcional a um vetor do subespaço g -dimensional associado a λ_1 , com a sua direção particular dentro desse subespaço dependendo do vetor inicial $|\phi_1\rangle$.

O espaço formado pelos vetores $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, \dots, |\phi_n\rangle$, $n \leq N$ é conhecido como subespaço de Krylov,

$$K_n\{H, |\phi_1\rangle\} = \{|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, \dots, |\phi_n\rangle\}. \quad (\text{A.7})$$

No método da potência olhamos apenas para os dois últimos vetores desta sequência. Podemos no entanto tentar utilizar toda a informação contida na sequência através de uma combinação linear conveniente,

$$|\psi_n\rangle = p_n^1 |\phi_1\rangle + p_n^2 |\phi_2\rangle + \dots + p_n^n |\phi_n\rangle, \quad (\text{A.8})$$

onde por enquanto os coeficientes p_n^k da expansão acima estão à nossa disposição. Arranjando estes coeficientes em um vetor $|p_n\rangle = |p_n^1, p_n^2, \dots, p_n^n\rangle$ e denotando a

matriz $N \times n$ formada pelos vetores coluna $|\phi_k\rangle$ por Φ_n , escrevemos

$$|\psi_n\rangle = \Phi_n |p_n\rangle. \quad (\text{A.9})$$

Podemos agora encontrar o vetor $|p_n\rangle$ de acordo com o procedimento variacional de Ritz-Galerkin [82, 124], que consiste em formar o resíduo

$$|\rho_n\rangle = H|\psi_n\rangle - \theta_n|\psi_n\rangle \quad (\text{A.10})$$

para um dado valor de θ_n e exigir que este resíduo se localize, tanto quanto possível, no subespaço ortogonal ao subespaço de Krylov $K_n\{H, |\phi_1\rangle\}$. É claro que quando n aumenta, $|\rho_n\rangle$ tem de ser ortogonal a um subespaço cada vez maior, com $|\psi_n\rangle$ neste subespaço, de forma que em última instância o resíduo se anula e $\{\theta_n, |\psi_n\rangle\}$ se torna um autopar de H . Na prática impomos um limite superior para $\| |\rho_n\rangle \|$ a partir do qual $\{\theta_n, |\psi_n\rangle\}$ passa a ser uma aproximação aceitável para um autopar legítimo de H . Uma vez que o subespaço $K_n\{H, |\phi_1\rangle\}$ contém a mesma quantidade de informação utilizada pelo método da potência, o procedimento de Ritz-Galerkin converge no mínimo tão rapidamente quanto este; na verdade, converge muito mais rápido.

Por razões de estabilidade, é melhor trabalhar com uma base ortonormal para $K_n\{H, |\phi_1\rangle\}$, o que pode ser feito com o procedimento de Gram-Schmidt. Sejam $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, \dots, |\phi_j\rangle$ ortonormais. Geramos o próximo vetor da sequência calculando $|\tilde{\phi}_{j+1}\rangle = H|\phi_j\rangle$, projetando-o ortogonalmente aos vetores prévios da sequência,

$$|\tilde{\phi}_{j+1}\rangle \leftarrow |\tilde{\phi}_{j+1}\rangle - \sum_{k=1}^j \langle \phi_k | \tilde{\phi}_{j+1} \rangle |\phi_k\rangle$$

e finalmente normalizando-o

$$|\phi_{j+1}\rangle = \frac{|\tilde{\phi}_{j+1}\rangle}{\| |\tilde{\phi}_{j+1}\rangle \|}.$$

Com esta base Φ_n fica ortonormal, e o procedimento de Ritz-Galerkin reduz-se em

$$(\Phi_n^\dagger H \Phi_n)|p_n\rangle = \theta_n|p_n\rangle, \quad (\text{A.11})$$

isto é, temos um problema de autovalor para a matriz $\Phi_n^\dagger H \Phi_n$, de ordem $n \times n$. Este problema de autovalores em geral é suficientemente pequeno para ser resolvido pelos métodos padrões da álgebra linear computacional, como por exemplo pelo método QR [82, 124]. Mais ainda, podemos selecionar θ_n em uma região particularmente interessante do autoespectro de H para obter um vetor $|\psi_n\rangle$ no subespaço gerado pelos vetores de H de autovalores próximos a θ_n (no sentido de mínimo resíduo).

Se a nossa matriz original é simétrica ou hermitiana, o procedimento de Ritz-Galerkin se torna equivalente ao procedimento de Lanczos [186], e a matriz $\Phi_n^\dagger H \Phi_n$ é tridiagonal simétrica ou hermitiana; se a matriz H não for simétrica, temos o procedimento de Arnoldi [81], com $\Phi_n^\dagger H \Phi_n$ uma matriz Hessenberg superior, i.e., triangular superior com mais uma subdiagonal. Os autopares $\{\theta_n, |\psi_n\rangle\}$ aproximados são ditos valores e vetores de Ritz. Estes métodos geralmente fornecem excelentes aproximações para as regiões mais externas do espectro de H para valores bastante pequenos de n , $n \ll N$ (tipicamente $N \sim 10^5 - 10^6$, enquanto $n \sim 100 - 500$). Devemos ressaltar que no caso de matrizes simétricas em geral se obtêm métodos bastante econômicos e estáveis do ponto de vista de sua implementação numérica, enquanto a estabilidade dos algoritmos para os casos não simétricos só se obtém à custa de um aumento considerável na demanda por memória RAM ou de tráfego de dados nos discos e *buses* [82].

O procedimento de Ritz-Galerkin pode ser aplicado a qualquer subespaço, não necessariamente ao subespaço de Krylov. Recentemente, surgiu bastante interesse no algoritmo de Davidson [187] para gerar subespaços convenientes quando a matriz H é dominada por sua diagonal, $\|H\| \simeq \|\text{diag}(H)\|$. O interesse em física surgiu ligado à idéia de grupo de renormalização por matriz densidade no estudo de sistemas eletrônicos fortemente correlacionados [188], já que a matriz densidade é dominada por sua diagonal, além de muitas aplicações em química quântica. Para estes casos, o algoritmo de Davidson se mostrou consideravelmente mais eficiente

que o tradicional algoritmo de Lanczos. A vantagem de se trabalhar com subespaços de Krylov, no entanto, reside no fato de que sua construção exige apenas a operação de multiplicação de uma matriz por um vetor, o que pode ser implementado eficientemente para matrizes esparsas muito grandes a um custo razoável de tempo e memória. O mesmo não acontece com o algoritmo de Davidson, o qual requer uma inversão matricial a cada passo na construção do subespaço que implica no mínimo em dobrar o número de operações de multiplicação de matriz por vetor.

B

As equações de Burgers, Kardar-Parisi-Zhang e o processo de exclusão

B.1 A equação de Burgers

As ondas não-dispersivas mais simples que existem são as ondas planas hiperbólicas descritas pela equação

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad (\text{B.1})$$

onde $u = u(x, t)$ é a amplitude da onda e v é uma constante com dimensão de velocidade, $[v] = LT^{-1}$. A solução da eq. (B.1) é imediata,

$$u(x, t) = u_0(x - vt), \quad (\text{B.2})$$

e representa a propagação sem distorção de um perfil inicial $u_0(x) = u(x, t = 0)$. Estas ondas são ditas não-dispersivas porque sua velocidade de propagação não depende das frequências envolvidas na onda que se propaga.

É possível generalizar a eq. (B.1) e escrever uma “lei de conservação hiperbólica” [189]

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v(u) \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (\text{B.3})$$

com condição inicial $u_0(x) = u(x, t = 0)$, e com a velocidade de propagação $v(u)$ dependente da amplitude da onda. Podemos resolver esta equação pelo método das características [189, 190], como segue. Definindo uma curva característica C no plano (x, t) por

$$\frac{dx}{dt} = v(u), \quad (\text{B.4})$$

vemos que sobre a curva C a eq. (B.3) se torna

$$\frac{du}{dt} = 0, \quad (\text{B.5})$$

isto é, u é constante sobre C . Uma vez que isto significa que $v(u)$ também é constante sobre C , vemos que as curvas características são linhas retas no plano (x, t) de inclinação $(v(u))^{-1}$. Impondo as condições iniciais $x(t = 0) = x_0$, encontramos que $u(x, t) = u_0(x_0)$ sobre C , e obtemos uma solução implícita para a eq. (B.3) na forma

$$\begin{cases} x(t) &= x_0 + v(u_0(x_0))t, \\ u(x, t) &= u_0(x_0). \end{cases} \quad (\text{B.6})$$

Repare que, ainda que de forma implícita, podemos escrever $u(x, t) = u_0(x - v(u)t)$, em analogia com a eq. (B.2).

Se pudermos determinar $x_0 = x_0(x, t)$ a partir da primeira das Eqs. (B.6), encontramos $u(x, t)$ para todo x, t . Este porém não é sempre o caso, e quando encontramos duas características que se intersectam temos problemas. Pode-se provar [189, 190], usando o teorema da função implícita, que no caso de termos

$$\frac{d}{dx_0}v(u_0(x_0)) < 0 \quad (\text{B.7})$$

para algum x_0 na condição inicial, então no instante t dado por $t^{-1} = \min\{\frac{d}{dx_0}v(u_0(x_0))\}$ as derivadas parciais $\partial_t u(x, t)$ e $\partial_x u(x, t)$ divergem, e a solução da eq. (B.3) deixa de ser única. Este fenômeno analítico se traduz fisicamente na formação de ondas de choque, nas quais a amplitude $u(x, t)$ da onda muda abruptamente em uma região muito pequena do espaço. A formação de ondas de choque é um fenômeno típico das equações do tipo (B.3). Uma das formas de se “suavizar” este efeito consiste em levar em consideração interações locais com o meio, tal como uma dissipação viscosa, que leva a equações do tipo

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v(u)\frac{\partial u}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad (\text{B.8})$$

com ν o coeficiente de dissipação com dimensões $[\nu] = L^2T^{-1}$.

Tomando $v(u) = vu$ na eq. (B.3), obtemos a equação de Riemann

$$\frac{\partial u}{\partial t} + vu \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad (\text{B.9})$$

que descreve o fluxo de partículas não-interagentes ao longo do eixo x com velocidade u [190]. Adicionando o termo de dissipação linear a esta equação, procedimento também conhecido como regularização parabólica, obtemos a equação de Burgers unidimensional

$$\frac{\partial u}{\partial t} + vu \frac{\partial u}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad (\text{B.10})$$

que acompanhada de condições iniciais aleatórias $u_0(x)$ é uma das equações mais investigadas da mecânica dos fluidos contemporânea, uma vez que ela pode ser considerada uma aproximação unidimensional da equação de Navier-Stokes

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \vec{\nabla}) \vec{u} = -\vec{\nabla} p + \nu \nabla^2 \vec{u} + \vec{f}, \quad (\text{B.11})$$

descrevendo o fluxo (campo de velocidades) $\vec{u} = \vec{u}(\vec{x}, t)$ de um fluido quando se desprezam o gradiente de pressão $-\vec{\nabla} p$ e a força externa \vec{f} .

Na equação de Burgers, o fluxo parece ser aleatório mesmo quando as condições iniciais são suaves, não aleatórias, e este fato é um dos principais motivos para o interesse nela e na teoria da turbulência em geral. Uma pergunta básica acerca da equação de Burgers é: dadas condições iniciais aleatórias $u(x, t = 0) = u_0(x)$, como as inhomogeneidades iniciais de $u_0(x)$ se propagam no tempo ao longo do fluxo de Burgers $u = u(x, t)$? Como se pode imaginar, esta é uma questão difícil que envolve em sua investigação conceitos sofisticados de análise e teoria de probabilidades, tais como análise funcional não-linear e teoria de campos aleatórios, e vem mobilizando as comunidades de físicos e matemáticos desde sua introdução por J. M. Burgers no final dos anos 30 como um modelo para a turbulência [40, 191].

Recentemente, a equação de Burgers voltou à pauta entre os físicos devido à sua relação com certos modelos de crescimento de superfícies, mais especifica-

mente com o modelo de Kardar-Parisi-Zhang [39], que descrevemos brevemente a seguir.

B.2 A equação de Kardar-Parisi-Zhang

Suponha que uma superfície cresce através de um processo de deposição balística, no qual uma partícula, que pode ser um átomo ou molécula de um vapor químico, por exemplo, atinge a superfície em uma posição aleatória e se deposita sobre ela em uma direção perpendicular à da superfície já existente. Vamos derivar a equação diferencial que descreve o comportamento macroscópico de um tal processo de crescimento seguindo a derivação original de Kardar, Parisi, e Zhang [39]. Veja também a derivação baseada em argumentos de simetria e leis de conservação esboçada na Seção 2.2. A geometria desta derivação aparece na Fig. B.1. Dada uma função $h = h(\vec{x}, t)$ descrevendo o perfil instantâneo de uma superfície que cresce sobre um substrato d -dimensional, a fração δh que cresce na direção de h pela adição de massa que atinge a superfície perpendicularmente a uma velocidade v durante um intervalo de tempo δt é dada por

$$\delta h = \sqrt{(v\delta t)^2 + (v\delta t\vec{\nabla}h)^2} \simeq v\delta t\left[1 + \frac{1}{2}(\vec{\nabla}h)^2\right] \quad (\text{B.12})$$

para $\|\vec{\nabla}h\| \ll 1$. Fazendo $\delta t \rightarrow 0$, transformando as alturas para o referencial que se move com velocidade v , $h \rightarrow h - vt$, e adicionando um termo de relaxação difusivo para levar em consideração o movimento das partículas sobre a superfície devido, por exemplo, à tensão superficial, obtemos a equação de Kardar-Parisi-Zhang

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{v}{2}(\vec{\nabla}h)^2 + v\nabla^2 h + \eta, \quad (\text{B.13})$$

onde $\eta = \eta(\vec{x}, t)$ é um ruído branco, isto é, um ruído com as propriedades $\langle \eta(\vec{x}, t) \rangle = 0$ e $\langle \eta(\vec{x}, t)\eta(\vec{x}', t') \rangle = 2\Gamma\delta^d(\vec{x} - \vec{x}')\delta(t - t')$, adicionado para representar as flutuações no processo de deposição. Este termo é muito importante, pois sem ele a equação acima se torna determinística e pode ser resolvida exatamente para qualquer valor da dimensionalidade d do espaço [39]. Dois exemplos de ruído muito utilizados tanto

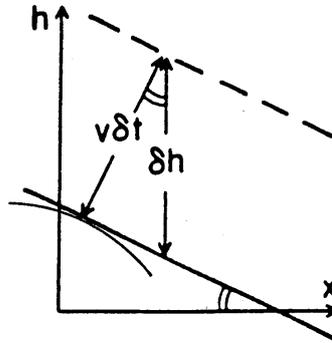


Figura B.1: Geometria para a derivação da equação de Kardar-Parisi-Zhang.

analiticamente quanto numericamente são o ruído gaussiano, com distribuição de probabilidades $P(\eta) \propto \exp(-\eta^2)$, e o ruído de Bernoulli simétrico, com distribuição de probabilidades $P(\eta) \propto \delta(\eta + 1) + \delta(\eta - 1)$.

A equação de Kardar-Parisi-Zhang pode ser transformada na equação de Burgers com ruído pela substituição $\vec{u} = -\vec{\nabla}h$, com o ruído dado pelo gradiente do ruído original e com $v = \frac{1}{2}$ na eq. (B.13). Pode-se ainda efetuar a transformação $W(\vec{x}, t) = \exp[(\lambda/2v)h(\vec{x}, t)]$ e obter a partir da equação (B.13) a equação

$$\frac{\partial W}{\partial t} = v\nabla^2 W + \frac{\lambda}{2v}\eta W, \quad (\text{B.14})$$

que é uma equação de difusão em um potencial aleatório dependente do tempo. A função $W(\vec{x}, t)$ pode ser entendida como a soma dos pesos de Boltzmann para todas as configurações estáticas de um polímero $(d + 1)$ -dimensional de extremidades $(\vec{0}, 0)$ e (\vec{x}, t) , onde o termo de ruído descreve um potencial aleatório *quenched* exercido pelo meio sobre o polímero [39, 192]. Como podemos ver, a equação de Kardar-Parisi-Zhang é uma das mais interessantes equações diferenciais parciais não-lineares da atualidade, pelo menos tão interessante quanto a equação de Burgers com ruído.

B.3 O limite hidrodinâmico do processo de exclusão assimétrico

O processo de exclusão simples é um dos modelos microscópicos de partículas interagentes mais bem estudados [88]. Neste processo, partículas inicialmente distribuídas em uma rede $\Lambda \subseteq \mathbb{Z}^d$, com no máximo uma partícula por sítio, aguardam um tempo aleatório distribuído exponencialmente com parâmetro unitário e então tentam se mover para um dos sítios vizinhos mais próximos, efetuando o movimento no caso de o sítio almejado estar desocupado. Em uma dimensão ($d = 1$), se a partícula salta para a direita com probabilidade $p \in [0, 1]$ e para a esquerda com probabilidade $q = 1 - p$, obtemos o processo de exclusão simples assimétrico quando $p \neq q$.

A existência de um processo de Markov único $\{X_t, t \geq 0\}$ correspondente ao processo descrito acima é garantido pelos teoremas gerais de existência para os sistemas de partículas interagentes [88]. O sistemas de equações diferenciais estocásticas correspondentes ao processo de exclusão simples unidimensional assimétrico são

$$\begin{aligned} dX_t(\ell) &= X_t(\ell - 1)[1 - X_t(\ell)]dP_t(\ell - 1) - X_t(\ell)[1 - X_t(\ell + 1)]dP_t(\ell) \\ &+ X_t(\ell + 1)[1 - X_t(\ell)]dQ_t(\ell + 1) - X_t(\ell)[1 - X_t(\ell - 1)]dQ_t(\ell) \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

para todo $\ell \in \Lambda$, onde $P_t(\ell)$ e $Q_t(\ell)$ são dois processos de Poisson homogêneos de parâmetros p e $q = 1 - p$, respectivamente. Estes processos fazem os papéis de “alarmes”: quando um deles “toca”, a partícula tenta se mover na direção correspondente.

O limite hidrodinâmico do processo de exclusão assimétrico pode ser obtido a partir de um reescalonamento hiperbólico das posições e tempos das grandezas que aparecem na eq. (B.15) [181, 193],

$$\begin{aligned} X_t^\varepsilon(x) &= \sum_{\ell \in \Lambda} X_{\varepsilon^{-1}t}(\ell) \mathbf{1}\{[\varepsilon\ell, \varepsilon(\ell + 1)]\}(x), \\ P_t^\varepsilon(x) &= \sum_{\ell \in \Lambda} \varepsilon P_{\varepsilon^{-1}t}(\ell) \mathbf{1}\{[\varepsilon\ell, \varepsilon(\ell + 1)]\}(x), \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

$$Q_t^\varepsilon(x) = \sum_{\ell \in \Lambda} \varepsilon Q_{\varepsilon^{-1}t}(\ell) \mathbf{1}\{[\varepsilon\ell, \varepsilon(\ell + 1)]\}(x),$$

onde $\mathbf{1}\{[a, b]\}(x)$ é a função indicadora do intervalo $[a, b] \subset \mathbb{R}$, que vale um se $x \in [a, b]$ e zero em caso contrário, e $\varepsilon > 0$ é o parâmetro de reescalonamento. Definindo as operações

$$F^{\pm\varepsilon}u(x) = u(x)[1 - u(x \pm \varepsilon)] \quad \text{e} \quad D^{\pm\varepsilon}u(x) = \pm\varepsilon^{-1}[u(x \pm \varepsilon) - u(x)],$$

para uma função real contínua qualquer $u(x)$, o sistema de equações diferenciais estocásticas (B.15) pode ser reescrito em termos do processo reescalonado como

$$dX_t^\varepsilon(x) = -D^{-\varepsilon}[F^{+\varepsilon}X_t^\varepsilon(x)dP_t^\varepsilon(x)] + D^{+\varepsilon}[F^{-\varepsilon}X_t^\varepsilon(x)dQ_t^\varepsilon(x)]. \quad (\text{B.17})$$

No limite $\varepsilon \rightarrow 0$, com probabilidade um obtemos

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} P_t^\varepsilon(x) = pt \quad \text{e} \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} Q_t^\varepsilon(x) = qt = (1 - p)t, \quad (\text{B.18})$$

e também

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} D^{\pm\varepsilon}u(x) = \frac{\partial u(x)}{\partial x} \quad \text{e} \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} F^{\pm\varepsilon}u(x) = u(x)[1 - u(x)], \quad (\text{B.19})$$

de forma que o processo estocástico $X_t^\varepsilon(x)dx$ converge (fracamente) com probabilidade um para a função $u(x, t)dx$ solução da equação diferencial parcial

$$\frac{\partial u}{\partial t} + (2p - 1)\frac{\partial[u(1 - u)]}{\partial x} = 0, \quad (\text{B.20})$$

isto é, para a equação de Riemann (B.9).

Para $p = \frac{1}{2}$ a derivação apresentada acima não vale, e devemos neste caso usar o reescalonamento parabólico $x \rightarrow \varepsilon x$ e $t \rightarrow \varepsilon^{-2}t$, obtendo a equação de difusão usual [181].

Pode-se igualmente obter a equação de Burgers ao invés da equação de Riemann como o limite hidrodinâmico do processo de exclusão simples assimétrico,

porém desta vez tomando-o como um autômato celular probabilístico [194].

Estabelecemos portanto neste apêndice as relações que existem entre as equações de Burgers, de Kardar-Parisi-Zhang e o processo de exclusão simples assimétrico, como queríamos.

Bibliografia

- [1] MENDONÇA, J. R. G. Notas sobre a interação entre a mecânica estatística e os processos estocásticos. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 21, p. 63, 1999.
- [2] Veja os artigos de NIJBOER, B. R. A. General introduction, e de VAN KAMPEN, N. G. Fundamental problems in statistical mechanics of irreversible processes. In: COHEN, E. G. D. (Ed.). **Fundamental Problems in Statistical Mechanics**. Amsterdam: North-Holland, 1962.
- [3] Pode-se mostrar que a maioria esmagadora, “erdrückende Mehrzahl”, das soluções das equações de movimento que no instante inicial estão em algum estado longe do equilíbrio vão evoluir para estados mais próximos dele. As outras soluções são exceções, e correspondem a grandes flutuações, que se não são impossíveis de ocorrerem são ao menos bastante improváveis. O problema consiste justamente em dizer o quão bastante improváveis são essas exceções. Veja [2, 4].
- [4] LEBOWITZ, J. L.; PENROSE, O. Modern ergodic theory. **Physics Today**, v. 26, p. 23, 1973; LEBOWITZ, J. L. Boltzmann’s entropy and time’s arrow. **Physics Today**, v. 46, p. 32, 1993. Para uma revisão mais matemática.
- [5] Veja o volume especial de **Química Nova**, v. 17 (Nov/Dez 1994) dedicada ao sesquicentenário do nascimento de L. Boltzmann para uma boa coletânea de artigos de cientistas brasileiros sobre o tema.

- [6] LUZZI, R.; VASCONCELLOS, A. R. Statistical mechanics of dissipation and order: an overview. **Ciência e Cultura**, v. 43, p. 423, 1991; LUZZI, R.; VASCONCELLOS, A. R.; GARCIA-COLLIN, L. S. Statistical mechanics of dissipative systems: an information-theoretic approach. **Brazilian Journal of Physics**, v. 25, p. 20, 1995. Esses autores advogam uma abordagem cinética generalizada, variacional, diferente da das equações mestras.
- [7] Por mesoscópica entendemos uma escala de observação do espaço de fases que não distingue suas celas a ponto de podermos fazer observações de estados microscópicos individuais, porém também não tão grosseira a ponto de podermos desprezar flutuações termodinâmicas em prol de uma descrição determinística para as probabilidades de ocupação dessas celas. Em termos numéricos, se considerarmos flutuações de 0.1% nas grandezas termodinâmicas já não desprezíveis, então estamos entrando no regime mesoscópico sempre que nosso sistema tiver menos de $\sim 10^6$ partículas (em $d = 3$ dimensões). Nesse caso, ou fazemos uma descrição microscópica, o que significa resolver 10^6 equações de movimento acopladas e estudar distribuições de condições iniciais, ou usamos métodos estocásticos. Em sistemas de baixa dimensionalidade (em $d = 1$ ou 2 dimensões) o regime mesoscópico é facilmente alcançado.
- [8] O “Stoßzahlansatz” consiste em supor que o número de colisões binárias do tipo $(a, b) \rightarrow (c, d)$ por unidade de tempo é dado por $\Gamma_{c,d}^{a,b} n_a n_b$, com $\Gamma_{c,d}^{a,b}$ determinado unicamente pela lei de força, que Boltzmann supunha clássica, e os n 's números de ocupação para celas de tamanho finito no espaço de fases Γ .
- [9] COHEN, E. G. D. The Boltzmann equation and its generalization to higher densities. In: COHEN, E. G. D. (Ed.). **Fundamental Problems in Statistical Mechanics**. Amsterdam: North-Holland, 1962.
- [10] VAN KAMPEN, N. G. **Stochastic Processes in Physics and Chemistry**. 2. ed. rev. ampl. Amsterdam: North-Holland, 1992.

- [11] DRESDEN, M. A study of models in non-equilibrium statistical mechanics. In: DE BOER, J.; UHLENBECK, G. E. (Eds.). **Studies in Statistical Mechanics I**. Amsterdam: North-Holland, 1962.
- [12] OVCHINIKOV, A. A.; ZELDOVICH, Ya. B. Role of density fluctuations in bimolecular reaction kinetics. **Chemical Physics**, v. 28, p. 215, 1978; TOUSSAINT, D.; WILCZEK, F. Particle-antiparticle annihilation in diffusive motion. **Journal of Chemical Physics**, v. 78, p. 2642, 1983.
- [13] KANG, K.; REDNER, S. Scaling approach for the kinetics of recombination processes. **Physical Review Letters**, v. 52, p. 955, 1984; KANG, K.; REDNER, S. Fluctuation-dominated kinetics in diffusion-controlled reactions. **Physical Review A**, v. 32, p. 435, 1985.
- [14] VON SMOLUCHOWSKI, M. Versuch einer mathematischen Theorie der Koagulationskinetik kolloider Lösungen. **Zeitschrift für Physikalische Chemie**, v. 92, p. 129, 1917.
- [15] MONTROLL, E. W. Some historical remarks on the catalytic processes and on stochastic models of chemical kinetics. In: LANDMAN, U. (Ed.). **AIP Conference Proceedings**, v. 61, La Jolla Institute 1979. New York: AIP, 1980.
- [16] ISING, E. Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus. **Zeitschrift für Physik**, v. 31, p. 253, 1925.
- [17] PEIERLS, R. On Ising's model of ferromagnetism. **Proceedings of the Cambridge Philosophical Society**, v. 32, p. 477, 1936; GRIFFITHS, R. B. Peierls proof of spontaneous magnetization in a two-dimensional Ising ferromagnet. **Physical Review**, v. 136, p. 437, 1964.
- [18] HEISENBERG, W. Zur Theorie des Ferromagnetismus. **Zeitschrift für Physik**, v. 49, p. 619, 1928.
- [19] O modelo de Heisenberg se aplica melhor a elementos que apresentam os elétrons responsáveis pelo magnetismo razoavelmente ligados, oferecendo

- spins localizados, como ocorre com os elétrons dos orbitais $4f$ das terras-raras, por exemplo ${}_{58}\text{Ce}$, ${}_{63}\text{Eu}$ e ${}_{64}\text{Gd}$.
- [20] BLOCH, F. Zur Theorie des Ferromagnetismus. **Zeitschrift für Physik**, v. 61, p. 206, 1930.
- [21] BETHE, H. Zur Theorie der Metalle. I. Eigenwerte und Eigenfunktionen der linearen Atomkette. **Zeitschrift für Physik**, v. 71, 205, 1931.
- [22] ONSAGER, L. Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition. **Physical Review**, v. 65, p. 117, 1944; KAUFMAN, B. Crystal statistics. II. Partition function evaluated by spinor analysis. **Physical Review**, v. 76, p. 1232, 1949.
- [23] KASTELEYN, P. W. Exactly solvable lattice models. In: COHEN, E. G. D. (Ed.). **Fundamental Problems in Statistical Mechanics III**. Amsterdam: North-Holland, 1975.
- [24] BAXTER, R. J. **Exactly Solved Models in Statistical Mechanics**. London: Academic Press, 1982.
- [25] GLAUBER, R. J. Time-dependent statistics of the Ising model. **Journal of Mathematical Physics**, v. 4, p. 294, 1963.
- [26] KADANOFF, L. P.; SWIFT, J. Transport coefficients near the critical point: a master equation approach. **Physical Review**, v. 165, p. 310, 1968.
- [27] KAWASAKI, K. Kinetics of Ising models. In: DOMB, C.; GREEN, M. S. (Eds.). **Phase Transitions and Critical Phenomena**, Vol. 2. London: Academic Press, 1972.
- [28] KANDEL, D.; DOMANY, E.; NIENHUIS, B. A six-vertex model as a diffusion problem: derivation of correlation functions. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 23, p. L755, 1990.

- [29] GWA, L.-H.; SPOHN, H. Six-vertex model, roughened surfaces, and an asymmetric spin hamiltonian. **Physical Review Letters**, v. 68, p. 725, 1992; GWA, L.-H.; SPOHN, H. Bethe solution for the dynamical-scaling exponent of the noisy Burgers equation. **Physical Review A**, v. 46, p. 844, 1992.
- [30] BARMA, M.; GRYNBERG, M. D.; STINCHCOMBE, R. B. Jamming and kinetics of deposition-evaporation systems and associated quantum spin models. **Physical Review Letters**, v. 70, p. 1033, 1993; STINCHCOMBE, R. B.; GRYNBERG, M. D.; BARMA, M. Diffusive dynamics of deposition-evaporation systems, jamming, and broken symmetries in related quantum-spin models. **Physical Review E**, v. 47, p. 4018, 1993.
- [31] GRYNBERG, M. D.; NEWMAN, T. J.; STINCHCOMBE, R. B. Exact solutions for stochastic adsorption-desorption models and catalytic surface processes. **Physical Review E**, v. 50, p. 957, 1994; GRYNBERG, M. D.; STINCHCOMBE, R. B. Dynamic correlation functions of adsorption stochastic systems with diffusional relaxation. **Physical Review Letters**, v. 74, 1242, 1995; GRYNBERG, M. D.; STINCHCOMBE, R. B. Dynamics of adsorption-desorption processes as a soluble problem of many fermions. **Physical Review E**, v. 52, p. 6013, 1995; GRYNBERG, M. D.; STINCHCOMBE, R. B. Autocorrelation functions of driven reaction-diffusion processes. **Physical Review Letters**, v. 76, p. 851, 1996.
- [32] SCHUTZ, G. M. Diffusion-annihilation in the presence of a driving field. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 28, p. 3405, 1995; SCHUTZ, G. M. Nonequilibrium correlation functions in the $A + A \rightarrow \emptyset$ system with driven diffusion. **Physical Review E**, v. 53, p. 1475, 1996.
- [33] MENDONÇA, J. R. G.; DE OLIVEIRA, M. J. Stationary coverage of a stochastic adsorption-desorption process with diffusional relaxation. **Journal of Statistical Physics**, v. 92, p. 651, 1998; DE OLIVEIRA, M. J. Exact density profile of a stochastic reaction-diffusion process. **Physical Review E**, v. 53, p. 1475, 1999.

- [34] BARES, P. A.; MOBILIA, M. Diffusion-limited reactions of hard-core particles in one dimension. **Physical Review E**, v. 59, p. 1996, 1999; BARES, P. A.; MOBILIA, M. Solution of classical stochastic one-dimensional many-body systems. **Physical Review Letters**, v. 83, p. 5214, 1999.
- [35] PRIVMAN, V. (Ed.). **Nonequilibrium Statistical Mechanics in One Dimension**. Cambridge: Cambridge University Press, 1997.
- [36] MATTIS, D. C. **The Theory of Magnetism I: Statics and Dynamics**. Springer Series in Solid State Science, Vol. 17. Berlin: Springer-Verlag, 1981.
- [37] HUANG, K. **Statistical Mechanics**. 2. ed. New York: John Wiley & Sons, 1987.
- [38] MORIYA, T. Weak ferromagnetism. In: RADO, G. T.; SUHL, H. (Eds.). **Magnetism**, Vol. I. New York: Academic Press, 1963.
- [39] KARDAR, M.; PARISI, G.; ZHANG, Y.-C. Dynamic scaling of growing interfaces. **Physical Review Letters**, v. 56, p. 889, 1986.
- [40] WOYCZYŃSKI, W. A. **Burgers-KPZ Turbulence**. Lecture Notes in Mathematics, Vol. 1700. Berlin: Springer Verlag, 1998.
- [41] SCHÜTZ, G. M. Generalized Bethe ansatz solution of a one-dimensional asymmetric exclusion process on a ring with blockage. **Journal of Statistical Physics**, v. 71, p. 471, 1993.
- [42] ALCARAZ, F. C.; BARIÉV, R. Z. Exact solution of the asymmetric exclusion model with particles of arbitrary size. **Physical Review E**, v. 60, p. 79, 1999.
- [43] ALCARAZ, F. C.; RITTENBERG, V. Reaction-diffusion processes as physical realizations of Hecke algebras. **Physics Letters B**, v. 314, p. 377, 1993.

- [44] ALCARAZ, F. C.; DROZ, M.; HENKEL, M.; RITTENBERG, V. Reaction-diffusion processes, critical dynamics, and quantum chains. **Annals of Physics (N.Y.)**, v. 230, p. 250, 1994.
- [45] SANDOW, S.; SCHÜTZ, G. M. On $U_q[\text{SU}(2)]$ -symmetric driven diffusion. **Europhysics Letters**, v. 26, p. 7, 1994.
- [46] DAHMEN, S. R. Reaction-diffusion processes described by three-states quantum chains and integrability. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 28, p. 905, 1995.
- [47] DERRIDA, B.; DOMANY, E.; MUKAMEL, D. An exact solution of a one-dimensional asymmetric exclusion model with open boundaries. **Journal of Statistical Physics**, v. 69, p. 667, 1992; DERRIDA, B., EVANS, M. R.; HAKIN, V.; PASQUIEUR, V. Exact solution of a 1D asymmetric exclusion model using a matrix formulation. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 26, p. 1493, 1993.
- [48] FANNES, M.; NACHTERGAELE, B.; WERNER, R. F. Construction and study of exact ground states for a class of quantum antiferromagnets. **Revista Brasileira de Física**, v. 19, p. 460, 1989; FANNES, M.; NACHTERGAELE, B.; WERNER, R. F. Finitely correlated states on quantum spin chains. **Communications in Mathematical Physics**, v. 144, 443, 1992.
- [49] KRUG, J. Boundary induced phase transitions in driven diffusive systems. **Physical Review Letters**, v. 67, p. 1882, 1991.
- [50] KANDEL, D.; MUKAMEL, D. Defects, interface profiles and phase transitions in growth models. **Europhysics Letters**, v. 20, p. 325, 1992.
- [51] EVANS, M. R.; FOSTER, D. P.; GODRÉCHE, C.; MUKAMEL, D. Spontaneous symmetry breaking in a one dimensional driven diffusive system. **Physical Review Letters**, v. 74, p. 208, 1995; EVANS, M. R.; FOSTER, D. P.; GODRÉCHE, C.; MUKAMEL, D. Asymmetric exclusion model

- with two species – spontaneous symmetry breaking. **Journal of Statistical Physics**, v. 80, p. 69, 1995.
- [52] ALON, U.; EVANS, M. R.; HINRICHSEN, H.; MUKAMEL, D. Roughening transition in a one-dimensional growth process. **Physical Review Letters**, v. 76, p. 2746, 1996; ALON, U.; EVANS, M. R.; HINRICHSEN, H.; MUKAMEL, D. Smooth phases, roughening transitions, and novel exponents in one-dimensional growth models. **Physical Review E**, v. 57, 4997, 1998.
- [53] MENDONÇA, J. R. G. Roughening transition of a restricted solid-on-solid model in the directed percolation universality class. **Physical Review E**, v. 60, p. 1329, 1999.
- [54] TOOM, A. L. Nonergodic multidimensional systems of automata. **Problems of Information Transmission**, v. 10, p. 239, 1974; TOOM, A. Stable and attractive trajectories in multicomponent systems. In: DOBRUSHIN, R. L.; SINAI, Ya. G. (Eds.). **Multicomponent Random Systems**, Advances in Probability Vol. 6. New York: Marcel Dekker, 1980, p. 549.
- [55] BENNETT, C. H.; GRINSTEIN, G. Role of irreversibility in stabilizing complex and nonergodic behavior in locally interacting discrete systems. **Physical Review Letters**, v. 55, p. 657, 1985; BENNETT, C. H. Dissipation, anisotropy, and the stabilization of computationally complex states of homogeneous media. **Physica A**, v. 163, p. 393, 1990.
- [56] LEBOWITZ, J. L.; MAES, C.; SPEER, E. R. Statistical mechanics of probabilistic cellular automata. **Journal of Statistical Physics**, v. 59, p. 117, 1990.
- [57] TOMÉ, T.; DICKMAN, R. (Eds.). **Brazilian Journal of Physics**, v. 30, pp. 1–162 (2000).
- [58] HINRICHSEN, H. Nonequilibrium critical phenomena and phase transitions into absorbing states. **Advances in Physics**, v. 49, p. 815, 2000.

- [59] ARNDT, P.; HEINZEL, T.; RITTENBERG, V. First order phase transitions in one dimensional steady-states. **Journal of Statistical Physics**, v. 90, p. 783, 1998.
- [60] GÁCS, P.; LEVIN, L. A.; KURDYUMOV, G. L. One dimensional homogeneous media dissolving finite islands. **Problems of Information Transmission**, v. 14, p. 92, 1978; KURDYUMOV, G. L. An example of a nonergodic homogeneous one-dimensional random medium with positive transition probabilities. **Soviet Mathematics Doklady**, v. 19, p. 211, 1978; GÁCS, P. Reliable computation with cellular automata. **Journal of Computer and System Sciences**, v. 32, p. 15, 1986.
- [61] ZUREK, W. H. (Ed.). **Complexity, Entropy and the Physics of Information**. Santa Fe Institute Studies, Vol. VIII. Redwood: Addison Wesley, 1990.
- [62] FISHER, M. E.; BARBER, M. N. Scaling theory for finite-size effects in the critical region. **Physical Review Letters**, v. 28, p. 1516, 1972.
- [63] NIGHTINGALE, M. P. Scaling theory and finite systems. **Physica A**, v. 83, p. 561, 1976.
- [64] BARBER, M. N. Finite size scaling. In: DOMB, C.; LEBOWITZ, J. L. (Eds.). **Phase Transitions and Critical Phenomena**, Vol. 8. Londres: Academic Press, 1983.
- [65] BARABÁSI, A.-L.; STANLEY, H. E. **Fractal Concepts in Surface Growth**. Cambridge: Cambridge University Press, 1995.
- [66] MARSILI, M.; MARITAN, A.; TOIGO, F.; BANAVAR, J. R. Stochastic growth equations and reparametrization invariance. **Reviews of Modern Physics**, v. 68, p. 963, 1996.
- [67] EDWARDS, S. F.; WILKINSON, D. R. The surface statistics of a granular aggregate. **Proceedings of the Royal Society of London A**, v. 381, 17, 1982.

- [68] KARDAR, M.; ZHANG, Y.-C. Scaling of directed polymers in random media. **Physical Review Letters**, v. 58, p. 2087, 1987.
- [69] FISHER, D. S.; HUSE, D. A. Directed paths in a random potential. **Physical Review B**, v. 43, p. 10 728, 1991.
- [70] HALPIN-HEALY, T.; ZHANG, Y.-C. Kinetic roughening phenomena, stochastic growth, directed polymers, and all that. **Physics Reports**, v. 254, p. 215, 1995.
- [71] FORSTER, D.; NELSON, D. R.; STEPHEN, M. J. Large-distance and long-time properties of a randomly stirred fluid. **Physical Review A**, v. 16, p. 732, 1977.
- [72] MEAKIN, P.; RAMANLAL, P.; SANDER, L. M.; BALL, R. C. Ballistic deposition on surfaces. **Physical Review A**, v. 34, 5091, 1986.
- [73] 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: Mathematical and General**, v. 18, p. L75, 1985.
- [74] HOHENBERG, P. C.; HALPERIN, B. I. Theory of dynamic critical phenomena. **Reviews of Modern Physics**, v. 49, p. 435, 1977.
- [75] DOI, M. Second quantization representation for classical many-particle system. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 9, p. 1465, 1976.
- [76] PELITI, L. Path integral approach to birth-death processes on a lattice. **Journal de Physique**, v. 46, p. 1469, 1985.
- [77] SINAI, Ya. G. **Theory of Phase Transitions: Rigorous Results**. Oxford: Academic Press, 1982.
- [78] DERRIDA, B., LEBOWITZ, J. L.; SPEER, E. R.; SPOHN, H. Fluctuations of a stationary nonequilibrium interface. **Physical Review Letters**, v. 67, p. 165, 1991.

- [79] HENKEL, M.; HERRMANN, H. J. The Hamiltonian spectrum of directed percolation. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 23, p. 3719, 1990.
- [80] NEERGAARD, J.; DEN NIJS, M. Crossover scaling functions in one-dimensional dynamic growth models. **Physical Review Letters**, v. 74, p. 730, 1995.
- [81] ARNOLDI, W. E. The principle of minimized iterations in the solution of the matrix eigenvalue problem. **Quarterly of Applied Mathematics**, v. 9, p. 17, 1951; SAAD, Y. Practical use of some Krylov subspace methods for solving indefinite and nonsymmetric linear systems. **SIAM Journal of Scientific and Statistical Computing**, v. 5, p. 203, 1984.
- [82] SAAD, Y. **Numerical Methods for Large Eigenvalue Problems**. Manchester: Manchester University Press, 1992; SAAD, Y. **Iterative Methods for Sparse Linear Systems**. Disponível em: <http://www-users.cs.umn.edu/~saad/books.html>. Acesso em: 15 fev. 2000.
- [83] BULIRSCH, R.; STOER, J. Fehlerabschätzungen und Extrapolation mit rationalen Funktionen bei Verfahren von Richardson-Typos. **Numerische Mathematik**, v. 6, p. 413, 1964; HENKEL, M.; SCHÜTZ, G. Finite-lattice extrapolation algorithms. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 21, p. 2617, 1988.
- [84] JENSEN, I. Low density series expansion for directed percolation I: a new efficient algorithm with applications to the square lattice. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 32, p. 5233, 1999.
- [85] LOPEZ, J. M.; JENSEN, H. J. Nonequilibrium roughening transition in a simple model of fungal growth in 1+1 dimensions. **Physical Review Letters**, v. 81, p. 1734, 1998.

- [86] HELBING, D.; MUKAMEL, D.; SCHÜTZ, G. M. Global phase diagram of a one-dimensional driven lattice gas. **Physical Review Letters**, v. 82, p. 10, 1999.
- [87] RUELLE, D. **Thermodynamic Formalism**. Reading: Addison Wesley, 1978.
- [88] LIGGETT, T. M. **Interacting Particle Systems**. New York: Springer Verlag, 1985; LIGGETT, T. M. **Stochastic Interacting Systems: Contact, Voter, and Exclusion Processes**. Berlin: Springer Verlag, 1999.
- [89] ENTING, I. G. Crystal growth models and Ising models – disorder points. **Journal of Physics C**, v. 10, p. 1379, 1977.
- [90] DOMANY, E. Exact results for two- and three-dimensional Ising and Potts models. **Physical Review Letters**, v. 52, p. 871, 1984; DOMANY, E.; KINZEL, W. Equivalence of cellular automata to Ising models and directed percolation. **Physical Review Letters**, v. 53, p. 311, 1984.
- [91] KNUTH, D. E. **The Art of Computer Programming, Vol. 2: Seminumerical Algorithms**. 3. ed. Reading: Addison Wesley, 1998.
- [92] HALDANE, F. D. M. Continuum dynamics of the 1D Heisenberg anti-ferromagnet – identification with the $O(3)$ non-linear sigma-model. **Physics Letters A**, v. 93, p. 464, 1983; HALDANE, F. D. M. Non-linear field theory of large spin Heisenberg anti-ferromagnets – semi-classically quantized solitons of the one-dimensional easy-axis Néel state. **Physical Review Letters**, v. 50, p. 1153, 1983.
- [93] DEN NIJS, M.; ROMMELSE, K. Preroughening transition in crystal surfaces and valence-bond phases in quantum spin chains. **Physical Review B**, v. 40, p. 4709, 1989.
- [94] GIRVIN, S. M.; AROVAS, D. P. Hidden topological order in integer quantum spin chains. **Physica Scripta T**, v. 27, p. 156, 1989.

- [95] TASAKI, H. Quantum liquid in antiferromagnetic chains – a stochastic geometric approach to the Haldane gap. **Physical Review Letters**, v. 66, p. 798, 1991.
- [96] KENNEDY, T.; TASAKI, H. Hidden $Z_2 \times Z_2$ symmetry breaking in Haldane-gap antiferromagnets. **Physical Review B**, v. 45, p. 304, 1992; KENNEDY, T.; TASAKI, H. Hidden symmetry breaking and the Haldane phase in $S = 1$ quantum spin chains. **Communications in Mathematical Physics**, v. 147, p. 431, 1992.
- [97] HATSUGAI, Y.; KOHMOTO, M. Numerical study of the hidden antiferromagnetic order in the Haldane phase. **Physical Review B**, v. 44, 11789, 1991; HATSUGAI, Y. String correlation of quantum antiferromagnetic spin chains with $S = 1$ and 2. **Journal of the Physical Society of Japan**, v. 61, 3856, 1992.
- [98] ALCARAZ, F. C.; MOREO, A. Critical behavior of anisotropic spin- S Heisenberg chains. **Physical Review B**, v. 46, p. 2896, 1992; ALCARAZ, F. C.; HATSUGAI, Y. String correlation functions in the anisotropic spin-1 Heisenberg chain. **Physical Review B**, v. 46, p. 13918, 1992.
- [99] WHITE, S. R.; HUSE, D. A. Numerical renormalization-group of low-lying eigenstates of the antiferromagnetic $S = 1$ Heisenberg chain. **Physical Review B**, v. 48, p. 3844, 1993.
- [100] RITTENBERG, V. Comunicação pessoal.
- [101] MENDONÇA, J. R. G. Mean-field critical behaviour and ergodicity break in a nonequilibrium one-dimensional RSOS growth model. Em preparação.
- [102] JANSSEN, H. K. On the non-equilibrium phase-transition in reaction-diffusion systems with an absorbing stationary state. **Zeitschrift für Physik B**, v. 42, p. 151, 1981.
- [103] GRASSBERGER, P. On phase-transitions in Schlögl's second model. **Zeitschrift für Physik B**, v. 47, p. 365, 1982.

- [104] KINZEL, W.; YEOMANS, J. M. Directed percolation: a finite-size renormalization group approach. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 14, p. L163, 1981; KINZEL, W. Phase transitions of cellular automata. **Zeitschrift für Physik B**, v. 58, p. 229, 1985.
- [105] HARRIS, T. E. Contact interaction on a lattice. **Annals of Probability**, v. 2, p. 969, 1974.
- [106] SCHLÖGL, F. Chemical reaction models for nonequilibrium phase-transitions. **Zeitschrift für Physik**, v. 253, p. 147, 1972.
- [107] BROWER, R. C.; FURMAN, M. A.; MOSHE, M. Critical exponents for Reggeon quantum spin model. **Physics Letters B**, v. 76, p. 213, 1978.
- [108] MOSHE, M. Recent developments in Reggeon field-theory. **Physics Reports**, v. 37, p. 255, 1978.
- [109] GRASSBERGER, P.; DE LA TORRE, A. Reggeon field theory (Schlögl first model) on a lattice – Monte Carlo calculations of critical behavior. **Annals of Physics (N.Y.)**, v. 122, p. 373, 1979.
- [110] CARDY, J. L.; SUGAR, R. L. Directed percolation and Reggeon field-theory. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 13, p. L423, 1980.
- [111] ZIFF, R. M.; GULARI, E.; BARSHAD, Y. Kinetic phase-transitions in an irreversible surface-reaction model. **Physical Review Letters**, v. 56, p. 2553, 1986.
- [112] CHOPARD, B.; DROZ, M. Cellular automata approach to non-equilibrium phase transitions in a surface-reaction model – static and dynamic properties. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 21, p. 205, 1988.
- [113] GRINSTEIN, G.; LAI, Z.-W.; BROWNE, D. A. Critical phenomena in a nonequilibrium model of heterogeneous catalysis. **Physical Review A**, v. 40, p. 4820, 1989.

- [114] JENSEN, I.; FOGEDBY, H. C.; DICKMAN, R. Critical exponents for an irreversible surface-reaction model. **Physical Review A**, v. 41, p. 3411, 1990.
- [115] JENSEN, I. Critical behavior of the pair contact process. **Physical Review Letters**, v. 70, p. 1465, 1993.
- [116] JENSEN, I.; DICKMAN, R. Nonequilibrium phase transitions in systems with infinitely many absorbing states. **Physical Review E**, v. 48, p. 1710, 1993.
- [117] ALBANO, E. V. Irreversible phase transitions into nonunique absorbing states in a multicomponent reaction system. **Physica A**, v. 214, p. 426, 1995.
- [118] MUÑOZ, M. A.; GRINSTEIN, G.; DICKMAN, R.; LIVI, R. Critical behavior of systems with many absorbing states. **Physical Review Letters**, v. 76, p. 451, 1996.
- [119] JANSSEN, H. K. Spontaneous symmetry breaking in directed percolation with many colors: differentiation of species in the Gribov process. **Physical Review Letters**, v. 78, p. 2890, 1997.
- [120] KERTÉSZ, J.; WOLF, D. E. Anomalous roughening in growth processes. **Physical Review Letters**, v. 62, p. 2571, 1989.
- [121] HENKEL, M.; HERRMANN, H. J. The Hamiltonian spectrum of directed percolation. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 23, p. 3719, 1990; CARLON, E.; HENKEL, M.; SCHOLLWÖCK, U. Density matrix renormalization group and reaction-diffusion processes. **European Physical Journal B**, v. 12, p. 99, 1999.
- [122] CIEPLAK, M.; HENKEL, M.; KARBOWSKI, M., J.; BANAVAR, J. R. Master equation approach to protein folding and kinetic traps. **Physical Review Letters**, v. 80, p. 3654, 1998.
- [123] ZIEZOLD, H.; GRILLENBERGER, C. On the critical infection-rate of the one-dimensional contact process – numerical results. **Journal of Applied**

- Probability**, v. 25, p. 1, 1988; LIGGETT, T. M. Improved upper bound for the contact process critical value. **Annals of Probability**, v. 23, p. 697, 1995; SUDBURY, A. A method for finding bounds on critical values for non-attractive interacting particle systems. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 31, p. 8323, 1998.
- [124] GOLUB, G. H.; VAN LOAN, C. F. **Matrix Computations**. 3. ed. Baltimore: The Johns Hopkins University Press, 1996.
- [125] MOLER, C.; VAN LOAN, C. Nineteen dubious ways to compute the exponential of a matrix. **SIAM Review**, v. 20, p. 801, 1978; MOLER, C.; VAN LOAN, C. Nineteen dubious ways to compute the exponential of a matrix, twenty-five years later. **SIAM Review**, v. 45, p. 3, 2003.
- [126] GRASSMAN, W. K. Computational methods in probability theory. In: HEYMAN, D. P.; SOBEL, M. J. (Eds.). **Handbook of Operations Research and Management Science**. Amsterdam: North-Holland, 1990, p. 199.
- [127] STEWART, W. J. **Introduction to the Numerical Solution of Markov Chains**. Princeton: Princeton University Press, 1995.
- [128] MARRO, J.; DICKMAN, R. **Nonequilibrium Phase Transitions in Lattice Models**. Cambridge: Cambridge University Press, 1999.
- [129] GRASSBERGER, P. Directed percolation in $2 + 1$ dimensions. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 22, p. 3673, 1989.
- [130] SINGER, J. **Elements of Numerical Analysis**. New York: Academic Press, 1968.
- [131] JENSEN, I.; DICKMAN, R. Time-dependent perturbation-theory for nonequilibrium lattice models. **Journal of Statistical Physics**, v. 71, p. 89, 1993.
- [132] JENSEN, I. Critical exponents for branching annihilating random walks with an even number of offspring. **Physical Review E**, v. 50, p. 3623, 1994.

- [133] SUDBURY, A. The branching annihilating process – an interacting particle system. **Annals of Probability**, v. 18, p. 581, 1990.
- [134] MENDONÇA, J. R. G. Precise critical exponents for the basic contact process. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 32, p. L467, 1999.
- [135] GUNTON, J. D.; SAN MIGUEL, M.; SAHNI, P. S. The dynamics of first order phase transitions. In: DOMB, C.; LEBOWITZ, J. L. (Eds.). **Phase Transitions e Critical Phenomena**, Vol. 8. London: Academic Press, 1983, p. 267.
- [136] BRAY, A. J. Theory of phase ordering kinetics. **Advances in Physics**, v. 43, p. 357, 1994.
- [137] KRUG, J.; SPOHN, H. Kinetic roughening of growing interfaces. In: GODRÈCHE, C. (Ed.). **Solids far from Equilibrium: Growth, Morphology e Defects**. Cambridge: Cambridge University Press, 1990, p. 479.
- [138] ROST, H. Nonequilibrium behaviour of many-particle processes: density profile e local equilibrium. **Zeitschrift für Wahrscheinlichkeitstheorie und Verwandte Gebiete**, v. 58, p. 41, 1981.
- [139] MARCHAND, J.-P.; MARTIN, Ph. A. A microscopic derivation of the classical nucleation equation. **Physica A**, v. 127, p. 681, 1984.
- [140] MARCHAND, J.-P.; MARTIN, Ph. A. Exclusion process and droplet shape. **Journal of Statistical Physics**, v. 44, p. 491, 1986; Errata. **Journal of Statistical Physics**, v. 50, p. 469, 1988.
- [141] KANDEL, D.; DOMANY, E. Rigorous derivation of domain growth kinetics without conservation laws. **Journal of Statistical Physics**, v. 58, p. 685, 1990.
- [142] FERREIRA, A. L. C.; MENDIRATTA, S. K. Simulation of domain-wall dynamics in the SOS approximation of the 2D anisotropic Ising model:

- field driven case. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 24, p. 4397, 1991.
- [143] MAJUMDAR, S. N.; BARMA, M. Tag diffusion in driven systems, growing interfaces e anomalous diffusion. **Physical Review B**, v. 44, p. 5306, 1991; MAJUMDAR, S. N.; BARMA, M. Two-tag correlation functions in one-dimensional lattice gases. **Physica A**, v. 177, p. 366, 1991.
- [144] BARMA, M. Dynamics of field-driven interfaces in the two-dimensional Ising model. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 25, p. L693, 1992.
- [145] BINDER, P. M.; PACZUSKI, M.; BARMA, M. Scaling of fluctuations in one-dimensional interface e hopping models. **Physical Review E**, v. 49, p. 1174, 1994.
- [146] ABRAHAM, D. B.; NEWMAN, T. J.; SCHÜTZ, G. M. Nonequilibrium dynamics of finite interfaces. **Physical Review Letters**, v. 72, p. 3266, 1994.
- [147] STROBEL, T. Interface motion in a planar spin-flip model derived from exclusion on the line. **Journal of Statistical Physics**, v. 79, p. 923, 1995.
- [148] LIEB, E. H.; WU, F. Y. Two-dimensional ferroelectric models. In: DOMB, C.; GREEN, M. S. (Eds.). **Phase Transitions and Critical Phenomena**, Vol. 1. London: Academic Press, 1972, p. 332.
- [149] DHAR, D. An exactly solved model for interfacial growth. **Phase Transitions**, v. 9, p. 51, 1987.
- [150] KIM, D. Bethe ansatz solution for crossover scaling functions of the asymmetric XXZ chain e the Kardar-Parisi-Zhang-type growth model. **Physical Review E**, v. 52, p. 3512, 1995.
- [151] ALCARAZ, F. C.; WRESZINSKI, W. F. The Heisenberg XXZ Hamiltonian with Dzyaloshinsky-Moriya interactions. **Journal of Statistical Physics**, v. 58, p. 45, 1990.

- [152] PLISCHKE, M.; RÁCZ, Z; LIU, D. Time-reversal invariance e universality of two-dimensional growth models. **Physical Review B**, v. 35, p. 3485, 1987.
- [153] ARRATIA, R. The motion of a tagged particle in the simple symmetric exclusion system on Z . **Annals of Probability**, v. 11, p. 362, 1983.
- [154] DE MASI, A.; FERRARI, P. A. Self-diffusion in one-dimensional lattice gases in the presence of an external field. **Journal of Statistical Physics**, v. 38, p. 603, 1985.
- [155] FERRARI, P. A. The simple exclusion process as seen from a tagged particle. **Annals of Probability**, v. 14, p. 1277, 1986.
- [156] SPITZER, F. Interaction of Markov processes. **Advances in Mathematics**, v. 5, p. 246, 1970.
- [157] LIGGETT, T. M. Infinite particle systems with zero range interactions. **Annals of Probability**, v. 1, p. 240, 1973.
- [158] ANDJEL, E. D. Invariant measures for the zero range process. **Annals of Probability**, v. 10, p. 525, 1982.
- [159] SAADA, E. Zero-range process with a tagged particle. **Annales de l'Institut Henri Poincaré – Probabilités et Statistiques**, v. 26, p. 5, 1990.
- [160] EVANS, M. R. Phase transitions in one-dimensional nonequilibrium systems. **Brazilian Journal of Physics**, v. 30, p. 42, 2000.
- [161] SASAMOTO, T.; WADATI, M. One-dimensional asymmetric diffusion model without exclusion. **Physical Review E**, v. 58, p. 4181, 1998.
- [162] BOGOLIUBOV, N. M.; BULLOUGH, R. K.; PANG, G. D. Exact solution of a q -boson hopping model. **Physical Review B**, v. 47, p. 11495, 1993; BOGOLIUBOV, N. M.; NASSAR, T. On the spectrum of the non-Hermitian phase-difference model. **Physics Letters A**, v. 234, p. 345, 1997.

- [163] ALCARAZ, F. C.; BARRIEV, R. Z. Exact solution of a vertex model with unlimited number of states per bond. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 32, p. L25, 1999.
- [164] ALCARAZ, F. C.; BARRIEV, R. Z. An exactly solvable constrained XXZ chain. In: BATCHELOR, M. T.; WILLE, L. T. (Eds.). **Statistical Physics on the Eve of the 21st Century – In Honour of J. B. McGuire on the Occasion of His 65th Birthday**. Series on Advances in Statistical Mechanics, Vol. 14. Singapore: World Scientific, 1999, p. 412.
- [165] 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 models. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 20, p. 6397, 1987.
- [166] DEVILLARD, P. Interface motion in a two-dimensional Ising model with a field. **Journal of Statistical Physics**, v. 62, p. 443, 1991.
- [167] OLVER, F. W. J. **Asymptotics and Special Functions**. New York: Academic Press, 1974.
- [168] ALCARAZ, F. C.; MENDONÇA, J. R. G. Exact field-driven interface dynamics in the two-dimensional stochastic Ising model with helicoidal boundary conditions. Em preparação, 2000.
- [169] WHITE, S. R. Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups. **Physical Review B**, v. 48, p. 10345, 1993.
- [170] HIEIDA, Y. Application of the density matrix renormalization group method to a non-equilibrium problem. **Journal of the Physical Society of Japan**, v. 67, p. 369, 1998.
- [171] CARLON, E.; HENKEL, M.; SCHOLLWÖCK, U. Density matrix renormalization group and reaction-diffusion processes. **European Physical Journal B**, v. 12, p. 99, 1999; CARLON, E.; HENKEL, M.; SCHOLLWÖCK, U.

- Critical properties of the reaction-diffusion model $2A \rightarrow 3A$, $2A \rightarrow \emptyset$. **Physical Review E**, v. 63, p. 036101, 2001.
- [172] HENKEL, M. Comunicação pessoal.
- [173] SHASTRY, B. S.; JHA, S. S.; SINGH, V. (Eds.). **Exactly Solvable Problems in Condensed Matter and Relativistic Field Theory**. Lecture Notes in Physics, Vol. 242. Berlin: Springer Verlag, 1985.
- [174] CARDY, J.; TÄUBER, U. C. Theory of branching and annihilating random walks. **Physical Review Letters**, v. 77, 4780, 1996; CARDY, J.; TÄUBER, U. C. Field theory of branching and annihilating random walks. **Journal of Statistical Physics**, v. 90, p. 1, 1998.
- [175] HINRICHSEN, H. Stochastic lattice models with several absorbing states. **Physical Review E**, v. 55, p. 219, 1997.
- [176] HWANG, W; KWON, S.; PARK, H.; PARK, H. Critical phenomena of nonequilibrium dynamical systems with two absorbing states. **Physical Review E**, v. 57, p. 6438, 1998.
- [177] INUI, N.; TRETYAKOV, A. Critical behavior of the contact process with parity conservation. **Physical Review Letters**, v. 80, p. 5148, 1998.
- [178] BARMA, M. Deposition-evaporation dynamics: jamming, conservation laws, and dynamical diversity. In: PRIVMAN, V. (Ed.). **Nonequilibrium Statistical Mechanics in One Dimension**. Cambridge: Cambridge University Press, 1997.
- [179] DICKMAN, R. Universality and diffusion in nonequilibrium critical phenomena. **Physical Review B**, v. 40, p. 7005, 1989; JENSEN, I.; DICKMAN, R. Time-dependent perturbation theory for diffusive nonequilibrium lattice models. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 26, p. L151, 1993.

- [180] MENDONÇA, J. R. G. Dynamical exponents of an even-parity-conserving contact process with diffusion. Preprint. Disponível em: <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0107371>). Acesso em: 17 jul. 2001.
- [181] SPOHN, H. **Large Scale Dynamics of Interacting Particles**. New York: Springer Verlag, 1991.
- [182] ALCARAZ, F. C.; BARIEV, R. Z. Exact solution of asymmetric diffusion with second-class particles of arbitrary size. **Brazilian Journal of Physics**, v. 30, p. 13, 2000; ALCARAZ, F. C.; BARIEV, R. Z. Exact solution of asymmetric diffusion with N classes of particles of arbitrary size and hierarchical order. **Brazilian Journal of Physics**, v. 30, p. 655, 2000.
- [183] SCHÜTZ, G. M. Exact solution of the master equation for the asymmetric exclusion process. **Journal of Statistical Physics**, v. 88, p. 427, 1997.
- [184] ALIMOHAMMADI, A.; KARIMIPOUR, V.; KHORRAMI, M. Exact solution of a one-parameter family of asymmetric exclusion processes. **Physical Review E**, v. 57, p. 6370, 1998.
- [185] WILKINSON, J. H. **The Algebraic Eigenvalue Problem**. Oxford: Oxford University Press, 1965.
- [186] LANCZOS, C. An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators. **Journal of Research of the National Bureau of Standards**, v. 45, p. 255, 1950.
- [187] DAVIDSON, E. R. The iterative calculation of a few of the lowest eigenvalues and corresponding eigenvectors of large real symmetric matrices. **Journal of Computational Physics**, v. 17, p. 87, 1975.
- [188] WHITE, S. R. Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups. **Physical Review B**, v. 48, p. 10345, 1993. Veja também os artigos em PESCHEL, I.; WANG, X.; KAULKE, M.; HALBERG, K. (Eds.). **Density-matrix renormalization – A new numerical method in physics**. Berlin: Springer Verlag, 1999.

- [189] LAX, P. D. **Hyperbolic Systems of Conservation Laws and the Mathematical Theory of Shock Waves**. Philadelphia: SIAM, 1973.
- [190] SMOLLER, J. **Shock Waves and Reaction-Diffusion Equations**. New York: Springer Verlag, 1983.
- [191] BURGERS, J. M. **The Nonlinear Diffusion Equation**. Dordrecht: D. Reidel, 1974.
- [192] MEDINA, E.; HWA, T.; KARDAR, M.; ZHANG, Y.-C. Burgers equation with correlated noise: renormalization-group analysis and applications to directed polymers and interface growth. **Physical Review A**, v. 39, p. 3053, 1989.
- [193] BENASSI, A.; FOUQUE, J. P. Hydrodynamical limit for the asymmetric simple exclusion process. **Annals of Probability**, v. 15, p. 546, 1987.
- [194] BOGHOSIAN, B. M.; LEVERMORE, C. D. A cellular automaton for Burgers' equation. **Complex Systems**, v. 1, p. 17, 1987.