

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA



RICARDO LOPES DE JESUS

EXPANSÃO EM POLÍMEROS E SUAS APLICAÇÕES A MODELOS DE
SPINS LIMITADOS

Belo Horizonte

2020

Ricardo Lopes de Jesus

**EXPANSÃO EM POLÍMEROS E SUAS APLICAÇÕES A MODELOS DE
SPINS LIMITADOS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Matemática do Instituto de Ciências Exatas-ICEX da Universidade Federal de Minas Gerais como requisito parcial para à obtenção do título de Mestre em Matemática.

Orientador: Prof. Dr. Paulo Cupertino de Lima

Coorientador: Prof. Dr. Aldo Procacci

Belo Horizonte

2020

© 2020, Ricardo Lopes de Jesus.
Todos os direitos reservados

Ficha catalográfica elaborada pelo bibliotecário Célio Resende
Diniz - CRB 6ª Região nº 2403

Jesus, Ricardo Lopes de.

J58e Expansão em polímeros e suas aplicações a modelos
de spins limitados / Ricardo Lopes de Jesus — Belo
Horizonte, 2020.
82 f. il.; 29 cm.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de
Minas Gerais – Departamento de Matemática.

Orientador: Paulo Cupertino de Lima.
Coorientador: Aldo Procacci.

1. Matemática – Teses. 2. Mecânica estatística –
Teses. 3. Teoria cinética dos gases – Teses. I. Orientador.
II. Coorientador. II. Título.

CDU 51(043)



FOLHA DE APROVAÇÃO

*Expansão em polímeros e suas aplicações a modelos
de spins limitados*

RICARDO LOPES DE JESUS

Dissertação defendida e aprovada pela banca examinadora constituída pelos Senhores:

Prof. Paulo Cupertino de Lima
UFMG

Prof. Aldo Procacci
UFMG

Prof. Bernardo Nunes Borges de Lima
UFMG

Prof. Rémy de Paiva Sanchis
UFMG

Belo Horizonte, 21 de fevereiro de 2020.

Agradecimentos

“Até aqui nos ajudou o Senhor.” 1 Samuel 7:12

O “nos”, na frase acima, é para enfatizar o fato que não fazemos nada sozinhos. Por isso quero aqui deixar meus sinceros agradecimentos àqueles que foram peça chave para a realização desse trabalho.

Agradeço inicialmente ao ser no qual acredito ter sido minha fortaleza durante todo o meu percurso de vida até aqui, o Deus todo poderoso que me acompanha e dá suporte para todas as minhas realizações.

Agradeço à minha família, minhas irmãs Renata e Ruane e aos meus pais Renato e Iracema, por serem tão compreensivos com a minha ausência e serem suporte para que eu sempre corra atrás dos meus sonhos. Aos meus pais agradeço ainda por, mesmo sem escolarização, nunca medirem esforços para que eu e minhas irmãs fossemos cada vez mais longe nos estudos.

A todos os meus familiares que direta ou indiretamente contribuíram para essa conquista.

Agradeço à minha companheira, amiga e namorada Géssica, por ter sido sempre paciente, incentivadora e por ter me ajudado segurar a barra sempre que fraquejei.

Agradeço aos colegas e amigos que fiz na minha caminhada acadêmica, o que para mim é uma das melhores coisas que o estudo me proporciona. Em especial agradeço à turma da M13, residência onde morei na graduação e local de tantas alegrias, tutoriais e garrafas de café noite adentro, meu muito obrigado a essa nova família que a universidade me deu. Aos amigos do ensino básico, os quais me orgulho de ter comigo até hoje; os da graduação e agora os do mestrado, muito obrigado e que eu possa ter o privilégio de conhecer muitos outros.

Agradeço aos muitos professores que passaram por minha vida e deixaram sua contribuição para o que eu sou hoje. Professora Fernanda e o Professor Ivanilson, por todo o esforço intelectual e até financeiro para que fizéssemos vestibular na época do ensino médio. Na graduação, fui inicialmente acolhido pelo Professor Valdenberg, o qual me ajudou durante toda a formação com amizade, instrução e encaminhamentos que sem dúvida me proporcionaram todo o resto até aqui. Aos professores do DFI e DMA da UFS, meu muito obrigado por tudo que aprendi, com um afeto especial àqueles que foram além da sala de aula a exemplo de Gerson e Wilberclay, que se tornaram mais que orientadores. É claro, são tantos que não posso citar todos, embora gostaria, pois ainda correria o risco de esquecer alguém, mas agradeço de coração à todos que tive o privilégio de estudar.

Agradeço ao meu co-orientador, Professor Aldo Procacci, pela paciência e boa recepção nos

encontros que tivemos, bem como a motivação sempre com uma pitada de bom humor. Agradeço também aos funcionários do ICEX, em especial às secretárias Andréa e Kelli, por serem sempre atenciosas e prestativas com nossas necessidades. À CAPES pelo apoio financeiro e rogo para que outras pessoas possam continuar desfrutando desse benefício decisivo na vida de muitos, como foi o meu caso.

Aos professores Bernardo Nunes, Gustavo Oliveira e Rémy Sanchis por aceitarem participar da banca e ajudar a melhorar este trabalho.

Ao meu orientador, Paulo Cupertino de Lima, que junto com o Professor Aldo, foi o principal motivador deste trabalho. Obrigado pela amizade, discussões, esforço, paciência com minhas limitações e estar sempre disponível a ajudar. Espero conseguir ser tão trabalhador e disciplinado como vocês me mostraram ser. Obrigado, Paulo, por ter me recebido bem desde o primeiro semestre do mestrado.

O professor Gerson me disse uma vez que no fundo somos um pouquinho de cada pessoa que passa por nossa vida. Posso dizer com certeza que sou privilegiado e agradecido por tantas pessoas fantásticas que passaram pela minha.

-Professor, isso é real, ou está acontecendo somente na minha mente?
-É claro que está acontecendo na sua mente, Harry, mas por que isso significa que não é real?
(Harry Potter e as Relíquias da Morte)

Resumo

Nesta dissertação fazemos um estudo da técnica de *expansão em polímeros*, a qual desempenha um papel fundamental em mecânica estatística rigorosa, no estudo de transições de fase em sistemas físicos. Discutimos a analiticidade da pressão para o modelo do *gás de polímeros abstrato* e, baseados nas ideias discutidas neste modelo, fazemos algumas aplicações da técnica em outros modelos tais como o *gás de subconjuntos na rede \mathbb{Z}^d* e o *modelo de Ising*. Também aplicamos expansão em polímeros ao modelo Blume-Emery-Griffiths, na região de parâmetros conhecida como *desordenada* e obtivemos resultados sobre a analiticidade da *energia livre* deste modelo para qualquer valor de temperatura.

Palavras-chave: Expansão em polímeros. Transições de fase. Sistemas de spins. Analiticidade da energia livre. Modelo BEG.

Abstract

In this dissertation we study the *polymer expansion technique*, which plays a fundamental role in rigorous statistical mechanics, in the study of phase transitions in physical systems. We discuss the pressure analyticity for the *abstract polymer gas model* and, based on the ideas discussed in this model, we make some applications of the technique in other models such as the *subset gas on the lattice \mathbb{Z}^d* and the *Ising model*. We also applied polymer expansion to the Blume-Emery-Griffiths model, in the region of parameters known as *disordered* and we obtained results about analyticity of *free energy* of this model for all temperature.

Keywords: Polymers expansion. Phase transitions. Spins systems. Analyticity of free energy. BEG model.

Sumário

1	Introdução	11
2	Preliminares	13
2.1	Grafos	13
2.2	Existência da pressão no limite termodinâmico	18
2.3	Identidade Grafo-árvore de Penrose	24
3	Expansão em Polímeros	31
3.1	Gás de Polímeros Abstrato	31
3.2	Caso <i>Hard Core</i>	38
3.2.1	Reorganizando a série $\Pi_{\gamma_0}^*(\rho)$	45
3.2.2	Árvores e convergência	47
3.2.3	Critérios de Convergência	52
3.3	Aplicações da Expansão em Polímeros	57
3.3.1	Modelo Dominó em \mathbb{Z}^2	57
3.3.2	Gás na rede em um grafo de grau limitado	58
3.3.3	Modelo de um gás de subconjuntos finitos de um conjunto enumerável	60
3.4	Modelo de Ising em altas temperaturas	63
4	Modelos de Spins na rede \mathbb{Z}^d	71
5	Analiticidade da energia livre do modelo BEG na região desordenada	79
	Referências Bibliográficas	89

Capítulo 1

Introdução

Mecânica estatística é um campo da física que tem como objetivo obter informações macroscópicas de um sistema de partículas interagentes a partir de informações microscópicas de seus constituintes (átomos, moléculas, íons, etc), o que é feito por meio de uma abordagem probabilística.

No caso de cristais, as suas redes cristalinas podem ser modeladas pela rede \mathbb{Z}^d , onde em cada sítio da mesma temos um átomo. Em particular, uma amostra de um cristal pode ser modelada por um subconjunto $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ finito e as propriedades microscópicas expressando as interações entre os átomos em Λ são dadas pelo seu Hamiltoniano, H_Λ , o qual pode depender de vários parâmetros, tais como a temperatura, campo magnético, dentre outros. A partir deste, definimos a *energia livre no volume* Λ , a qual é dada por $\psi_\Lambda \doteq (\log \mathbf{Z}_\Lambda)/|\Lambda|$, onde $\mathbf{Z}_\Lambda = \sum_{\omega \in \Omega_0^\Lambda} e^{-H_\Lambda(\omega)}$ é chamada de *função de partição* em Λ e Ω_0 é o espaço de estado de um átomo (por exemplo, dado $i \in \Lambda$, $\omega_i \in \Omega_0$ pode ser um dos possíveis estados do spin no sítio i). Na prática, $|\Lambda|$ é muito grande ($> 10^{23}$) e precisamos estudar o limite $\Lambda \uparrow \mathbb{Z}^d$, chamado de *limite termodinâmico*. Em particular, temos a *energia livre no volume termodinâmico*, ψ , dada por $\psi \doteq \lim_{\Lambda \uparrow \mathbb{Z}^d} \frac{\log \mathbf{Z}_\Lambda}{|\Lambda|}$.

Um dos problemas centrais em mecânica estatística é o estudo dos fenômenos de *transições de fases* em sistemas físicos, os quais fazem parte do nosso cotidiano (por exemplo, a transição da fase ferromagnética para paramagnética em materiais como Fe, Co e Ni). Uma possível caracterização de uma transição de fase é a não-analiticidade da energia livre ψ em relação a algum dos parâmetros que a define.

Com intuito de estudarmos o fenômeno de transição fase, utilizaremos uma técnica chamada *expansão em polímeros* que, com origem na mecânica estatística, através de Mayer, hoje desempenha um papel importante em diversas outras áreas do conhecimento tais como: teoria de campos, teoria de grafos, combinatória, etc., permitindo a obtenção de resultados rigorosos que nenhum outro método até então fora capaz de fornecer.

Para usarmos a expansão em polímeros, buscamos inicialmente reescrever a função de partição do sistema original (expressa em termos, por exemplo, de configurações de spins) em termos de objetos geométricos (grafos, contornos na rede, etc), chamados *polímeros*, cujas definições dependem do regime de interesse do parâmetro ao qual analisamos a analiticidade da energia livre; por exemplo, se o parâmetro for a temperatura, podemos procurar representações para a função de partição no regime de altas ou baixas temperaturas, nos levando a diferentes noções de polímeros.

Na representação em polímeros, as funções de partições geralmente possuem uma estrutura comum que pode ser explorada para fornecer, sob certas condições, uma informação detalhada dos seus logaritmos, em termos de séries, através da expansão em polímeros. Ou seja, ao realizarmos uma sequência de operações obtemos uma representação para \mathbf{Z}_Λ como a exponencial de uma série. Em seguida buscamos critérios para garantir a convergência absoluta dessa série, justificando os rearranjos feitos na sua prova e assim garantirmos a analiticidade da energia livre do sistema, portanto, mostrando a ausência de transição de fase do mesmo.

A seguir descreveremos a organização desta dissertação.

Começamos com alguns conceitos preliminares no Capítulo 2, relativos ao que será discutido no resto do texto. Neste capítulo encontram-se definições e propriedades da teoria de grafos, incluindo resultados sobre grafos tipo árvores que serão muito usados em nossos cálculos, por exemplo, a *fórmula de Cayley*, onde damos uma demonstração para esse resultado que nos permite contar o número de árvores com vértices no conjunto $\{1, 2, \dots, n\}$. Na seção seguinte do mesmo capítulo demonstramos a existência da pressão (equivalentemente da energia livre, pois estas diferem por uma constante) no limite termodinâmico e a sua independência das condições de fronteiras, para um modelo particular conhecido como modelo de Ising, mas os argumentos usados podem ser facilmente generalizados para modelos bem mais gerais, onde em particular a interação entre as partículas não precisam ocorrer entre vizinhos mais próximos, mas cujo alcance seja finito. Na próxima seção, demonstramos uma importante identidade grafo-árvore, conhecida como *identidade de Penrose*, e usando-a demonstramos um recente resultado, obtido no trabalho de Procacci e Yuhjtman [20], que fornece uma cota superior para uma soma sobre grafos conexos em termos de uma soma sobre árvores.

No Capítulo 3, baseados essencialmente em [7] e [19], discutimos um dos modelos de expansão em polímeros que merece destaque, o modelo de *gás de polímeros abstrato*. Trata-se de um modelo que tem um papel fundamental em mecânica estatística e teoria dos campos, pois inúmeros modelos nessas áreas podem ser reformulados a partir deste. Discutimos os critérios de convergência para a série da pressão desse modelo, a saber os critérios de Kotecký-Preiss, Dobrushin e, por fim, o critério de Fernández-Procacci. Ainda no Capítulo 3 consideramos aplicações da expansão em polímeros, baseados nas ideias discutidas para o modelo de gás de polímeros abstrato, em modelos como o modelo gás de subconjuntos finitos na rede e o modelo de Ising no regime de altas temperaturas.

No Capítulo 4, fazemos uma análise de modelos de spins limitados na rede \mathbb{Z}^d e, sob certas hipóteses, obtemos um critério para a analiticidade da pressão nesses tipos de modelos, este resultado é expresso no Teorema 4.1.

Por fim, no Capítulo 5, usamos a expansão em polímeros, através do critério de Fernández-Procacci para a convergência da série do logaritmo da função de partição, bem como a identidade grafo-árvore obtida na Proposição 2.2 e obtemos um resultado, expresso no Teorema 5.1, que nos dá a analiticidade da energia livre do modelo Blume-Emery-Griffiths (BEG) na região de parâmetros chamada de desordenada. Este resultado trata-se de uma contribuição original desenvolvida nesta dissertação.

Capítulo 2

Preliminares

Neste capítulo estabelecemos alguns conceitos básicos necessários ao desenvolvimento desta dissertação. Inicialmente, daremos algumas definições e propriedades sobre grafos, em seguida, provaremos a existência da pressão no limite termodinâmico. Por fim, usando a identidade de Penrose, demonstraremos uma identidade grafo-árvore, obtida no trabalho de Procacci e Yuhjtman [20], que permite substituir uma soma sobre grafos conexos por uma sobre grafos tipo árvore, que é melhor sob o ponto de vista de contagem.

2.1 Grafos

Definição 2.1. Um *grafo* G é um par (V, E) , onde $V = V(G)$ é um conjunto enumerável, chamado conjunto de *vértices* de G e $E = E(G) = \{\{x, y\} : x, y \in V, x \neq y\}$ é o conjunto de *elos* (ou *arestas*) de G .

Definição 2.2. Um grafo é dito *simples* quando não possui elos paralelos (mais de um elo entre dois vértices) nem laços (elos cujos extremos estejam no mesmo vértice). Um grafo que não é simples chama-se *multigrafo*.

Definição 2.3. O número de vértices em um grafo é chamado de *ordem* do grafo e ao número de elos chamamos *dimensão* do grafo.

Na Figura 2.1 ilustramos a representação geométrica do grafo $G = (\{1, 2, 3, 4, 5\}, \{\{1, 2\}, \{1, 3\}, \{2, 3\}, \{2, 4\}, \{4, 5\}\})$, de ordem e dimensão iguais a 5 e 5, respectivamente, por meio de uma figura plana, constituída de pontos (os vértices de G) e de elos (um segmento de reta entre x e y em V , tais que $\{x, y\} \in E(G)$).

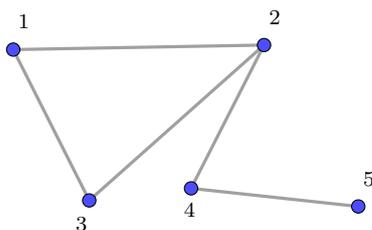


Figura 2.1: Exemplo de grafo.

Definição 2.4. Dado um grafo G , um elo diz-se *incidente* em um vértice v , se v é um dos extremos desse elo; dois vértices u e v são chamados *adjacentes* se $\{u, v\} \in E(G)$.

Definição 2.5. Dados dois grafos G e G' . Dizemos que G' é um *subgrafo* de G e que G é um supergrafo de G' quando $V(G') \subseteq V(G)$ e $E(G') \subseteq E(G)$. Por sua vez, chamamos de subgrafo de G *induzido* por um subconjunto de vértices V' , as vezes denotado por $G[V']$, o subgrafo obtido de G ignorando o subconjunto de vértices $V(G) \setminus V'$ e, conseqüentemente, os elos incidentes a eles. A Figura 2.2 mostra um exemplo de um subgrafo do grafo da Figura 2.1, induzido pelo subconjunto de vértices $\{1, 2, 3\}$, ou seja, $G[\{1, 2, 3\}]$.

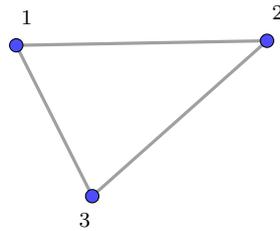


Figura 2.2: Exemplo de subgrafo do grafo da Figura 2.1.

Definição 2.6. Dizemos que um grafo G é *rotulado* em vértices (ou elos) quando a cada vértice (ou elo) estiver associado um rótulo. A Figura 2.1 exemplifica essa definição, onde os vértices do grafo estão rotulados através de números naturais.

Definição 2.7. Denominamos por grafo *completo* de ordem n e denotamos por K_n um grafo com n vértices dois a dois adjacentes. Por outro lado chamamos de grafo *nulo* (ou *vazio*) de ordem n , denotado por N_n , um grafo com n vértices dois a dois não adjacentes, em outras palavras, sem nenhum elo (Veja Figura 2.3).

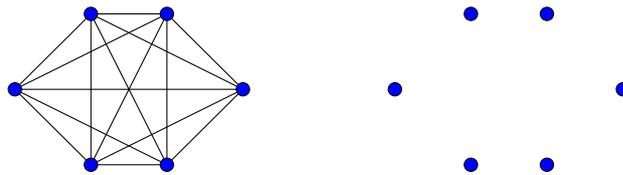


Figura 2.3: Um grafo completo K_6 e grafo nulo ou vazio N_6 .

Definição 2.8. Designa-se por grafo *complementar* de um grafo G e denota-se por \bar{G} , um grafo com o mesmo conjunto de vértices de G tal que dois vértices são adjacentes se, somente se, eles não são adjacentes em G . A Figura 2.4 abaixo, mostra um exemplo de grafo complementar de um grafo dado G .

Ao conjunto de todos os grafos rotulados com n vértices (ordem n) denotaremos por \mathcal{G}_n . Sendo \subseteq a relação binária definida em \mathcal{G}_n tal que $G_1 \subseteq G_2$ se, somente se, G_1 é subgrafo de G_2 , pode-se concluir que $(\mathcal{G}_n, \subseteq)$ é um conjunto parcialmente ordenado. Neste conjunto o único elemento maximal, com respeito a relação \subseteq , é o grafo completo K_n , enquanto o único elemento minimal é o grafo nulo N_n . Dois grafos são comparáveis, segundo a relação \subseteq , se um é subgrafo do outro. Note que, se $G \in \mathcal{G}_n \setminus \{K_n, N_n\}$, G e \bar{G} não são comparáveis.

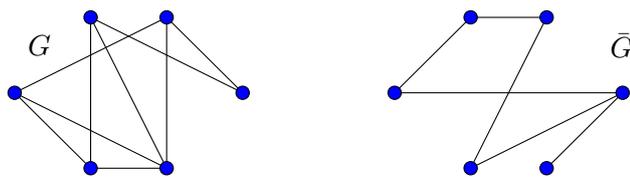


Figura 2.4: Grafos complementares.

Definição 2.9. Dado um grafo G e um vértice $v \in V(G)$, diz-se *grau* ou *valência* de v e denotamos por $\deg(v)$, o número de elos de G incidentes em v . O grau máximo dos vértices de G é denotado por $\Delta(G)$ e o mínimo por $\delta(G)$. Um vértice de grau 1 é chamado uma *folha do grafo*.

Definição 2.10. Um grafo é dito ser *regular* (de grau r ou r -regular) quando todos os seus vértices têm o mesmo grau (r). Por exemplo, a Figura 2.5 mostra um grafo 3-regular (O grafo K_6 na Figura 2.3 é outro exemplo de grafo regular, nesse caso de grau 5).

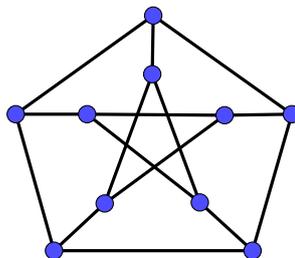


Figura 2.5: Grafo 3-regular.

Dados dois grafos G e H , a *união* desses dois grafos, $G \cup H$, é o grafo

$$G \cup H = (V(G) \cup V(H), E(G) \cup E(H))$$

e a *interseção* de G e H , denotada por $G \cap H$, é o grafo

$$G \cap H = (V(G) \cap V(H), E(G) \cap E(H)).$$

A partir disso é possível particionar um grafo G em grafos $G_1 = (V_1, E_1), \dots, G_k = (V_k, E_k)$ se $G = \cup_{j=1}^k G_j$ e $G_i \cap G_j = \emptyset$ para $i \neq j$, onde \emptyset representa o grafo dado pelo par (\emptyset, \emptyset) .

Com isso podemos definir um grafo conexo.

Definição 2.11. Um grafo G é dito *conexo* quando a única partição que ele admite é a trivial, ou seja, $G = G \cup \emptyset$. Caso contrário, dizemos que o grafo não é conexo ou *desconexo*.

Uma outra maneira de dizer que um grafo é conexo é dizer que, qualquer par de vértices está conectado por um caminho (conjuntos de elos) ao longo do grafo. Caso um grafo G não seja conexo, podemos construir uma partição de G em subgrafos que sejam conexos. Isso é expresso na próxima definição.

Definição 2.12. Um subgrafo de um grafo G é dito uma *componente conexa* (ou simplesmente uma *componente*) de G , se é um subgrafo conexo maximal, no sentido que, sendo induzido pelo conjunto de vértices V' , para todo $x \in V(G) \setminus V'$, o grafo $G[V' \cup \{x\}]$ não é conexo.

Chama-se de *passeio* em um grafo G , entre os vértices u e v , a qualquer sequência de vértices e elos (não necessariamente distintos) da forma

$$u = v_1, \{v_1, v_2\}, v_2, \dots, v_{k-1}, \{v_{k-1}, v_k\}, v_k = v.$$

Aqui, u é dito vértice inicial e v vértice final do passeio. Chama-se de *trajeto* em um grafo G , entre os vértices u e v , um passeio no qual não exista elos repetidos (podendo haver vértices repetidos). Um *caminho* em G , entre os vértices u e v , é um trajeto entre u e v no qual não existem vértices repetidos (exceto possivelmente o primeiro e o último). Um trajeto *fechado*, onde o vértice inicial coincide com o final, é chamado de *circuito* e se os únicos vértices que coincidem no trajeto fechado são os iniciais e finais, então chamamos este trajeto de *ciclo*.

Definição 2.13. Dado um grafo G , dizemos que G é *bipartido*, quando podemos particionar o conjunto de vértices de G em dois subconjuntos V' e V'' de modo que não exista elos entre qualquer par de vértices de V' nem entre qualquer par de vértices de V'' e que todo elo de G conecta um vértice de V' com um de V'' (veja Figura 2.6). Um tal grafo bipartido é usualmente denotado por $G(V', V'', E)$, onde E é seu conjunto de elos.

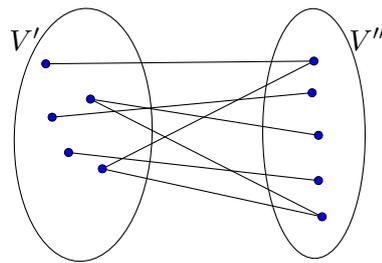
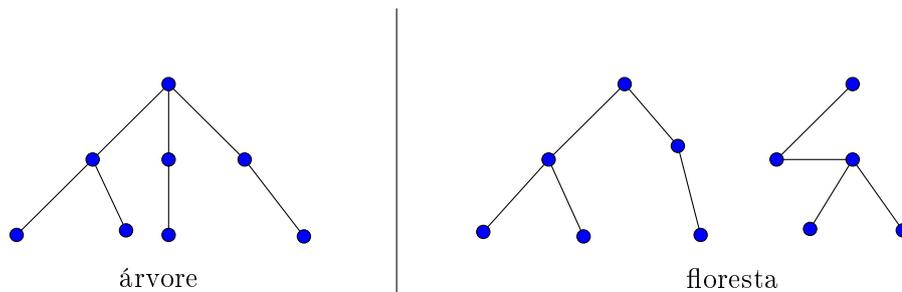


Figura 2.6: Exemplo de grafo bipartido.

A próxima definição nos dá uma classe de grafos conexos muito usada ao longo da dissertação e que é também uma classe especial de grafos bipartidos.

Definição 2.14. Os grafos conexos que não possuem ciclos (acíclicos) são denominados *árvores*. Por sua vez, chama-se *floresta* a todo grafo acíclico constituído por componentes conexas que são árvores.



A seguir, temos um teorema que caracteriza grafos do tipo árvore. Mas antes provaremos um lema a ser usado na demonstração desse teorema.

Lema 2.1. *Seja G um grafo conexo de ordem n . Então, G possui ao menos $n - 1$ elos.*

Demonstração: Faremos por indução em n : Se $n = 1$, temos que G não possui elos e vale a afirmação. Supondo agora que seja verdade para grafos conexos com número de vértice menor que n , devemos mostrar que vale para um grafo conexo com n vértices, seja H esse grafo. Ao tirarmos um vértice de H temos dois casos a analisar: o grafo resultante ainda permanece conexo e assim teríamos um grafo H' com número de vértices $n - 1$ e, por hipótese de indução, H' possui no mínimo $(n - 1) - 1$ elos e, conseqüentemente, H deve ter no mínimo $n - 1$ elos. O outro caso é se o grafo resultante não for conexo. Nesse caso consideramos as componentes conexas de H , digamos que existam k . Sejam n_1, \dots, n_k o número de vértices em cada componente, é claro que $n_i < n$ e, pela hipótese de indução, a componente i terá no mínimo $n_i - 1$ elos. Ao somarmos todos esses elos, temos $n_1 + n_2 + \dots + n_k - k = n - 1 - k$ e olhando de volta para H , o vértice que foi retirado estava conectado a cada componente por no mínimo k elos. Logo, H tem no mínimo $n - 1 - k + k = n - 1$ elos e segue a afirmação do lema. ■

Teorema 2.1. *Seja T um grafo. As seguintes condições são equivalentes:*

- 1) T é uma árvore;
- 2) T é conexo e possui $|V(T)| - 1$ elos;
- 3) T não tem ciclos, mas acrescentado um elo a T obtém-se um único ciclo.

Demonstração: Vamos mostrar inicialmente que 1) \implies 2): Por definição de árvores, temos que T é conexo. Agora procedemos por indução em $|V(T)|$. Se $|V(T)| = 1$, temos que T possui $0 = |V(T)| - 1$ elos. Supondo que a afirmação é verdadeira para grafos árvores com número de vértices menor que $|V(T)|$, devemos mostrar que vale também para árvores com $|V(T)|$ vértices. Com efeito, como T é uma árvore, a retirada de um elo $\{u, v\} \in E(T)$ divide T em duas componentes conexas que são também árvores, digamos T_1 e T_2 , cujos respectivos conjuntos de vértices têm cardinalidade menor que $|V(T)|$. Por hipótese de indução, T_1 possui $|V(T_1)| - 1$ elos e T_2 possui $|V(T_2)| - 1$. Por sua vez, $|E(T)| = |E(T_1)| + |E(T_2)| + 1 = (|V(T_1)| - 1) + (|V(T_2)| - 1) + 1 = |V(T)| - 1$.

Mostremos agora que 2) \implies 3): Suponha que T possui ciclos. Então deve existir um par de vértices que são ligados por mais de um caminho. Desta forma, retirando-se um dos elos em um dos caminhos entre esse par de vértice, sobrariam $|V(T)| - 2$ elos o que não é suficiente para que T seja conexo e, portanto, T não pode conter ciclos. Note que provamos também que não pode existir, sob as mesmas hipóteses, mais de um caminho ligando dois vértices. Isso nos leva a concluir que, se houvesse mais de um ciclo ao se adicionar um elo $\{u, v\}$ em T , deveríamos ter também mais de um caminho ligando u e v quando considerássemos $T \setminus \{u, v\}$, o que não acontece.

Por fim, para 3) \implies 1), basta mostrar que T é conexo. Mas se esse não fosse o caso, ao adicionarmos um elo ligando duas componentes conexas, não gerariamos um ciclo contrariando, assim, a hipótese 3). ■

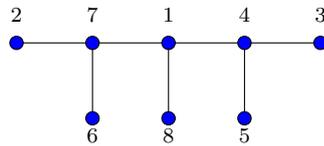
O resultado que enunciaremos a seguir é conhecido como *fórmula de Cayley* e tem grande utilidade pois nos permite calcular a cardinalidade do conjunto de todas as árvores com vértices em $\{1, \dots, n\}$ que denotamos por T_n . Essa fórmula foi introduzida em 1889 por Arthur Cayley e,

na literatura, existem várias demonstrações para ela. Aqui daremos uma demonstração devido a Prüfer [23].

Teorema 2.2. (*Fórmula de Cayley (1889)*). *Seja T_n o conjunto de todas as árvores com vértices em $[n] = \{1, \dots, n\}$. Então,*

$$\#T_n = n^{n-2}.$$

Demonstração: (Prüfer, (1918)). Seja \mathfrak{S} o conjunto de todas as sequências numéricas da forma $(t_1, t_2, \dots, t_{n-2})$, com $t_j \in \{1, \dots, n\}$. Temos, pelo princípio multiplicativo, que existem n^{n-2} sequências dessa forma em \mathfrak{S} . Basta construirmos uma bijeção entre \mathfrak{S} e T_n e o resultado segue. Para calcular a sequência de Prüfer $f(T)$ para uma árvore rotulada T , iterativamente delete a folha com menor rótulo e acrescente o rótulo vizinho à sequência. Depois de $n - 2$ iterações sobrarão apenas um elo e temos produzido uma sequência $f(T)$ de comprimento $n - 2$. Para a árvore abaixo, por exemplo, a sequência correspondente é 744171, e o elo que sobra é $\{1, 8\}$.



Para provar que f é uma bijeção, provaremos que a sequência pode vir apenas de uma árvore e que toda sequência surge dessa maneira. Suponha que em cada passo, ao calcular $f(T)$, marcamos a folha deletada como “encerrado”. Seja S o conjunto de folhas restantes na árvore; estes são vértices não encerrados cujos rótulos não aparecem no resto da sequência, devido ao processo de construção. A próxima folha deletada é o menor número que está em S . Assim podemos recuperar a árvore T da sequência $a = f(T)$ como segue: começando com o conjunto de vértices $[n]$ e sem elos. No passo i -ésimo, seja x o rótulo que aparece na posição i de a . Seja y o menor rótulo que não aparece nas posições depois da i -ésima e que ainda não foi usado. Adicionamos o elo $\{y, x\}$ e marcamos y como “encerrado”. No passo $n - 2$, unimos os dois vértices, que ainda não foram encerrados, por um elo.

Temos provado que se estes $n - 1$ elos formam uma árvore T , então $a = f(T)$, pois determinamos os elos que devem ter sido deletados de T em cada passo. Para ver que os elos formam uma árvore, note que começamos com um grafo (o grafo não trivial) em que toda componente tem um vértice não encerrado. Em cada passo, adicionamos um elo unindo vértices em componentes distintas e marcando-o como encerrado; isso reduz o número de componentes em 1 e deixa um vértice não encerrado em cada componente. O último elo une as duas componentes remanescentes. Assim, produzimos um grafo com $n - 1$ elos e apenas uma componente, ou seja, uma árvore. Provamos assim que esse procedimento reverso é, de fato, f^{-1} , e isso conclui o teorema. ■

2.2 Existência da pressão no limite termodinâmico

Nesta seção provaremos a existência da energia livre no limite termodinâmico e, sem perda de generalidade, vamos nos restringir ao modelo de Ising.

O modelo de Ising foi proposto em 1920 por Wilhelm Lenz [12] como um modelo matemático para descrever a transição de fase em materiais ferromagnéticos, tais como Fe, Co e Ni, descoberta por Pierre Curie, em 1895. Para tais materiais existe uma temperatura T_c , chamada de temperatura de Curie, abaixo da qual ao aplicarmos um campo magnético no material ele fica permanentemente imantado, mesmo após a retirada do campo magnético, o que não acontece para temperaturas acima de T_c . Estes dois regimes correspondem às fases ferromagnética e paramagnética, respectivamente. Este modelo foi resolvido em uma dimensão em 1925 por Ernst Ising [10], aluno de doutorado de Lenz. E, desde então, ele recebe o nome de modelo de Ising. Ising concluiu que a energia livre no limite termodinâmico é analítica nos seus parâmetros, portanto o modelo não apresenta transição de fase, uma vez que esta pode ser definida como a não analiticidade da energia livre em relação aos parâmetros que a define. Baseado neste fato, Ising concluiu que o mesmo valia para toda dimensão (portanto que o modelo não era adequado para descrever os materiais ferromagnéticos), o que foi mostrado não ser verdade para dimensão maior ou igual a dois, por Rudolf Peierls [18], em 1936. A partir de então este modelo se tornou o modelo de mecânica estatística mais estudado na descrição do fenômeno de transição de fase.

No modelo de Ising a rede cristalina é modelada por \mathbb{Z}^d , ou seja, em cada sítio da mesma existe um átomo, cada dos quais interage apenas com os seus vizinhos próximos, através dos seus spins (ao átomo no sítio $i \in \mathbb{Z}^d$ associamos a variável aleatória $\omega_i \in \{-1, 1\}$, representando os dois possíveis estados do spin do átomo). Se os átomos de uma amostra estão num subconjunto $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$, então uma configuração ω dos seus spins é um elemento de $\Omega_\Lambda = \{-1, 1\}^\Lambda$. Se em cada sítio de Λ tivermos um campo magnético externo $h \in \mathbb{R}$, então a *energia ou Hamiltoniano* de uma configuração ω com condições de fronteira livre, denotada por $H_{\Lambda;\beta,h}^\emptyset(\omega)$, é definida como

$$H_{\Lambda;\beta,h}^\emptyset(\omega) := -\beta \sum_{\substack{\{i,j\} \in \mathcal{E}_\Lambda \\ \|i-j\|=1}} \omega_i \omega_j - h \sum_{i \in \Lambda} \omega_i, \quad (2.1)$$

onde β é o inverso da temperatura. Neste caso não consideramos a interação entre os átomos de Λ e Λ^c . Se o quisermos fazê-lo, temos que especificar os spins na fronteira de Λ , denotada por $\partial\Lambda$, onde $\partial\Lambda = \{j \in \Lambda^c : \|j - i\|_1 = 1, \forall i \in \Lambda\}$. Em particular, se $\omega_i = \eta_i$, para todo $i \in \partial\Lambda$, então a *energia* de uma configuração ω com condição de fronteira η , denotada por $H_{\Lambda;\beta,h}^\eta(\omega)$, é definida como

$$H_{\Lambda;\beta}^\eta(\omega) := H_{\Lambda;\beta}^\emptyset(\omega) - \beta \sum_{\substack{i \in \Lambda, j \in \partial\Lambda \\ \|i-j\|=1}} \omega_i \eta_j. \quad (2.2)$$

A pressão do modelo de Ising no volume Λ com condição de fronteira arbitrária $\#$, denotada por $\psi_{\Lambda;\beta,h}^\#$, é definida como

$$\psi_{\Lambda;\beta,h}^\# := (\log \mathbf{Z}_{\Lambda;\beta,h}^\#) / |\Lambda|,$$

onde

$$\mathbf{Z}_{\Lambda;\beta,h}^\# = \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda} e^{-H_{\Lambda;\beta,h}^\#(\omega)}$$

é chamada de *função de partição* do modelo de Ising. A pressão do modelo de Ising no limite termodinâmico, denotada por $\psi_{\beta,h}^\#$, é definida como

$$\psi_{\beta,h}^{\#} := \lim_{\Lambda \uparrow \mathbb{Z}^d} \frac{\log \mathbf{Z}_{\Lambda;\beta,h}^{\#}}{|\Lambda|},$$

onde no limite acima, \uparrow denota que o limite é tomado no sentido de **van Hove**, ou seja, tomamos uma sequência $(\Lambda_n)_n$ satisfazendo $\Lambda_n \subset \Lambda_{n+1}$, $\cup_{n \geq 1} \Lambda_n = \mathbb{Z}^d$ e $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|\partial^{in} \Lambda_n|}{|\Lambda_n|} = 0$, onde $\partial^{in} \Lambda \doteq \{i \in \Lambda : \exists j \notin \Lambda, j \sim i\}$ (veja [7]). Um exemplo simples de sequência que satisfaz essa definição é a sequência de caixas $B(n) \doteq \{-n, \dots, n\}^d$.

Teorema 2.3. *No limite termodinâmico, a pressão*

$$\psi^{\#}(\beta, h) := \lim_{\Lambda \uparrow \mathbb{Z}^d} \psi_{\Lambda}^{\#}(\beta, h)$$

está bem definida, independe da sequência Λ convergindo para \mathbb{Z}^d no sentido de van Hove e do tipo de condições de fronteira.

Demonstração: Faremos a demonstração do teorema inicialmente para condições de fronteira livre e um tipo de sequência de subconjuntos de \mathbb{Z}^d e, em seguida, generalizamos para condições de fronteira qualquer e qualquer sequência convergindo à \mathbb{Z}^d no sentido de Van Hove.

Começaremos então mostrando a existência do limite

$$\lim_{D_n \uparrow \mathbb{Z}^d} \psi_{D_n}^{\emptyset}(\beta, h),$$

onde, por definição, $D_n = \{1, 2, \dots, 2^n\}^d$ e \emptyset significa condições de fronteira livre. Omitiremos o par (β, h) a título de simplificar a notação. A ideia é mostrarmos que a pressão associada a caixa D_{n+1} fica “próxima” da pressão associada a caixa D_n . Para isso, decompomos D_{n+1} em 2^d translações disjuntas de D_n e as denotamos por $D_n^{(1)}, D_n^{(2)}, \dots, D_n^{(2^d)}$ (veja Figura 2.7, extraída de [7]).

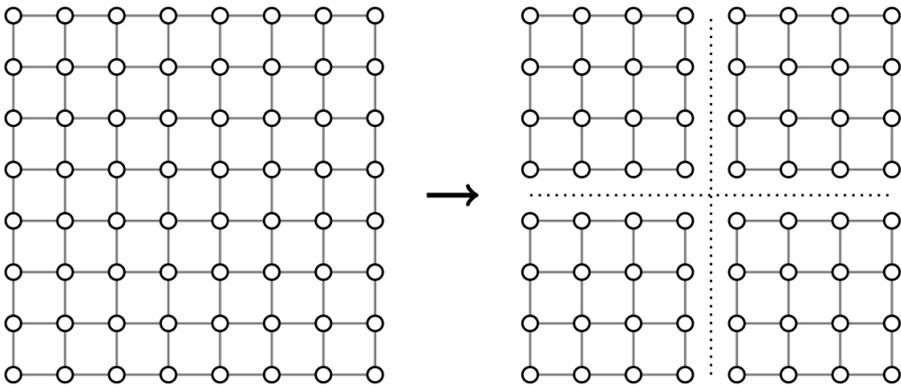


Figura 2.7: Partição da caixa D_{n+1} em 2^d translações de D_n .

Desta forma, para uma configuração ω em D_{n+1} , podemos escrever sua energia correspondente por

$$H_{D_{n+1}}^{\emptyset} = \sum_{i=1}^{2^d} H_{D_n^{(i)}}^{\emptyset} + R_n,$$

onde R_n representa a energia de interação entre pares que pertencem a caixas distintas. Agora, observando que cada face de D_{n+1} contém $(2^{n+1})^{d-1}$ pontos (a área da face), podemos controlar o termo de fronteira fazendo $|R_n(\omega)| \leq \beta d(2^{n+1})^{d-1}$. Logo,

$$-\beta d(2^{n+1})^{d-1} + \sum_{i=1}^{2^d} H_{D_n^{(i)}}^\varnothing \leq H_{D_{n+1}}^\varnothing \leq \beta d(2^{n+1})^{d-1} + \sum_{i=1}^{2^d} H_{D_n^{(i)}}^\varnothing.$$

Usando a desigualdade da esquerda, obtemos uma cota superior para a função de partição $\mathbf{Z}_{D_{n+1}}^\varnothing = \sum_{\omega \in \Omega_{D_{n+1}}} e^{-H_{D_{n+1}}^\varnothing(\omega)}$; a saber

$$\mathbf{Z}_{D_{n+1}}^\varnothing \leq e^{\beta d 2^{(n+1)(d-1)}} \sum_{\omega \in \Omega_{D_{n+1}}} \prod_{i=1}^{2^d} \exp\left(-H_{D_n^{(i)}}^\varnothing(\omega)\right).$$

Usando a decomposição feita em D_{n+1} , podemos substituir a soma nas configurações, que aparece na equação acima, por 2^d somas sobre $\omega^{(i)} \in D_n^{(i)}$ e distribuí-las nos blocos correspondentes,

$$\sum_{\omega \in \Omega_{D_{n+1}}} \prod_{i=1}^{2^d} \exp\left(-H_{D_n^{(i)}}^\varnothing(\omega)\right) = \prod_{i=1}^{2^d} \sum_{\omega^{(i)} \in \Omega_{D_n^{(i)}}} \exp\left(-H_{D_n^{(i)}}^\varnothing(\omega^{(i)})\right) = (\mathbf{Z}_{D_n}^\varnothing)^{2^d},$$

onde na última igualdade usamos que $\mathbf{Z}_{D_n^{(i)}}^\varnothing = \mathbf{Z}_{D_n}^\varnothing$, para todo i . De maneira similar, usando agora que $H_{D_{n+1}}^\varnothing \leq \beta d(2^{n+1})^{d-1} + \sum_{i=1}^{2^d} H_{D_n^{(i)}}^\varnothing$, podemos encontrar uma cota inferior para a função de partição $\mathbf{Z}_{D_{n+1}}^\varnothing$ e teremos, desta forma,

$$e^{-\beta d 2^{(n+1)(d-1)}} (\mathbf{Z}_{D_n}^\varnothing)^{2^d} \leq \mathbf{Z}_{D_{n+1}}^\varnothing \leq e^{\beta d 2^{(n+1)(d-1)}} (\mathbf{Z}_{D_n}^\varnothing)^{2^d}.$$

Aplicando o logaritmo, dividindo por $|D_{n+1}| = 2^{d(n+1)}$ e fazendo n suficientemente grande, concluímos que

$$|\psi_{D_{n+1}}^\varnothing - \psi_{D_n}^\varnothing| \leq \beta d 2^{-(n+1)}.$$

Isto implica que $\psi_{D_n}^\varnothing$ é uma sequência de Cauchy: para todo $n \leq m$,

$$|\psi_{D_m}^\varnothing - \psi_{D_n}^\varnothing| \leq \beta d \sum_{k=n+1}^m 2^{-k} = \beta d(2^{-n} - 2^{-m}).$$

Portanto, $\lim_{D_n \uparrow \mathbb{Z}^d} \psi_{D_n}^\varnothing(\beta, h)$ existe e o denotaremos por ψ .

Vamos considerar agora uma sequência arbitrária $\Lambda_n \uparrow \mathbb{Z}^d$. Fixamos algum inteiro k e consideramos uma partição de \mathbb{Z}^d formada por uma translação de blocos D_k , como anteriormente, que sejam adjacentes e disjuntos. Para cada n , consideremos uma cobertura mínima de Λ_n (veja Figura 2.8) por elementos $D_k^{(j)}$ da partição, e seja $[\Lambda_n] \doteq \cup_j D_k^{(j)}$.

Pela desigualdade triangular,

$$|\psi_{\Lambda_n}^\varnothing - \psi| \leq |\psi_{\Lambda_n}^\varnothing - \psi_{[\Lambda_n]}^\varnothing| + |\psi_{[\Lambda_n]}^\varnothing - \psi_{D_k}^\varnothing| + |\psi_{D_k}^\varnothing - \psi|. \quad (2.3)$$

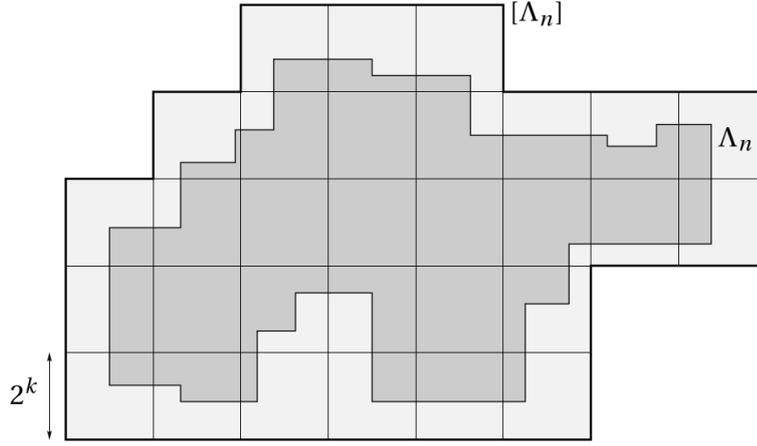


Figura 2.8: Cobertura de Λ_n por translações de D_k .

Fixando $\epsilon > 0$, como $\psi_{D_k}^\emptyset \rightarrow \psi$ quando $k \rightarrow \infty$, existe k_0 , dependendo de β, h e ϵ , tal que

$$|\psi_{D_k}^\emptyset - \psi| < \frac{\epsilon}{3}, \quad (2.4)$$

para todo $k \geq k_0$.

Para $\psi_{[\Lambda_n]}^\emptyset$, podemos escrever

$$H_{[\Lambda_n]}^\emptyset = \sum_j H_{D_k^{(j)}}^\emptyset + W_n,$$

onde o termo de fronteira $|W_n| \leq \beta \frac{|\Lambda_n|}{|D_k|} d(2^k)^{d-1} = \beta d 2^{-k} |\Lambda_n|$, com $\frac{|\Lambda_n|}{|D_k|}$ sendo o número de caixas necessárias para cobrir Λ_n . Portanto, existe um k_1 (dependente de β e ϵ) tal que

$$|\psi_{[\Lambda_n]}^\emptyset - \psi_{D_k}^\emptyset| \leq \beta d 2^{-k} < \frac{\epsilon}{3}, \quad (2.5)$$

para todo $k \geq k_1$. A partir de agora fixaremos $k \geq \max\{k_0, k_1\}$.

Escrevendo $\Delta_n \doteq [\Lambda_n] \setminus \Lambda_n$ e observando que

$$|H_{[\Lambda_n]} - H_{\Lambda_n}| = \left| -\beta \sum_{\{i,j\} \in \mathcal{E}_{\Delta_n \cup \partial \Lambda_n}} \omega_i \omega_j - h \sum_{i \in \Delta_n} \omega_i \right| \leq (2d\beta + |h|) |\Delta_n|,$$

ou seja,

$$-(2d\beta + |h|) |\Delta_n| + H_{\Lambda_n} \leq H_{[\Lambda_n]} \leq (2d\beta + |h|) |\Delta_n| + H_{\Lambda_n}.$$

Portanto,

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}_{[\Lambda_n]}^\emptyset &= \sum_{\omega \in \Omega_{[\Lambda_n]}} e^{-H_{[\Lambda_n]}^\emptyset(\omega)} \leq \sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda_n}} e^{-H_{\Lambda_n}^\emptyset(\omega)} \sum_{\omega' \in \Omega_{\Delta_n}} e^{(2d\beta + |h|) |\Delta_n|} \\ &= \mathbf{Z}_{\Lambda_n}^\emptyset e^{(2d\beta + |h|) |\Delta_n|} \sum_{\omega' \in \Omega_{\Delta_n}} 1 \\ &= \mathbf{Z}_{\Lambda_n}^\emptyset e^{(2d\beta + |h|) |\Delta_n|} 2^{|\Delta_n|} \\ &= \mathbf{Z}_{\Lambda_n}^\emptyset e^{(2d\beta + |h| + \log 2) |\Delta_n|}. \end{aligned}$$

De maneira similar, podemos obter uma cota inferior para $\mathbf{Z}_{[\Lambda_n]}^\varnothing$; a saber,

$$\mathbf{Z}_{\Lambda_n}^\varnothing e^{-(2d\beta+|h|-\log 2)|\Delta_n|} \leq \mathbf{Z}_{[\Lambda_n]}^\varnothing.$$

Como $-(2d\beta + |h| + \log 2)|\Delta_n| \leq -(2d\beta + |h| - \log 2)|\Delta_n|$, temos que

$$\mathbf{Z}_{\Lambda_n}^\varnothing e^{-(2d\beta+|h|+\log 2)|\Delta_n|} \leq \mathbf{Z}_{[\Lambda_n]}^\varnothing \leq \mathbf{Z}_{\Lambda_n}^\varnothing e^{(2d\beta+|h|+\log 2)|\Delta_n|}.$$

De onde tiramos que,

$$-(2d\beta + |h| + \log 2)|\Delta_n| + \log \mathbf{Z}_{\Lambda_n}^\varnothing \leq \log \mathbf{Z}_{[\Lambda_n]}^\varnothing \leq (2d\beta + |h| + \log 2)|\Delta_n| + \log \mathbf{Z}_{\Lambda_n}^\varnothing.$$

Observe que a cada vértice na fronteira de Λ_n podemos associar um bloco $D_k^{(j)}$ de maneira que Δ_n possui no máximo $|\partial^{in}\Lambda_n||D_k|$ vértices. Desse fato, e dividindo a expressão acima por $|\Lambda_n|$, temos

$$-(2d\beta + |h| + \log 2) \frac{|\partial^{in}\Lambda_n||D_k|}{|\Lambda_n|} + \psi_{\Lambda_n}^\varnothing \leq \psi_{[\Lambda_n]}^\varnothing \frac{|[\Lambda_n]|}{|\Lambda_n|} \leq (2d\beta + |h| + \log 2) \frac{|\partial^{in}\Lambda_n||D_k|}{|\Lambda_n|} + \psi_{\Lambda_n}^\varnothing.$$

Note que

$$1 \leq \frac{|[\Lambda_n]|}{|\Lambda_n|} \leq \frac{|\Lambda_n| + |\partial^{in}\Lambda_n||D_k|}{|\Lambda_n|} = 1 + \frac{|\partial^{in}\Lambda_n||D_k|}{|\Lambda_n|},$$

e como estamos tomando sequências que convergem para \mathbb{Z}^d no sentido de Van Hove, ou seja, $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|\partial^{in}\Lambda_n|}{|\Lambda_n|} = 0$, temos que $\frac{|[\Lambda_n]|}{|\Lambda_n|} \rightarrow 1$ quando $n \rightarrow \infty$. Com isso, segue que, para n suficientemente grande,

$$|\psi_{\Lambda_n}^\varnothing - \psi_{[\Lambda_n]}^\varnothing| < \frac{\epsilon}{3}. \quad (2.6)$$

Portanto, combinando as equações (2.3), (2.4), (2.5) e (2.6), temos que

$$|\psi_{\Lambda_n}^\varnothing - \psi| < \epsilon$$

e temos provado o teorema para uma sequência arbitrária $\Lambda_n \uparrow \mathbb{Z}^d$, com condições de fronteira livre. Resta apenas mostrar que para uma condição de fronteira qualquer o resultado também é verdade.

Consideremos $\Lambda \Subset \mathbb{Z}^d$ arbitrário e η uma condição de fronteira qualquer. Podemos escrever o Hamiltoniano em Λ , sob a condição de fronteira η , em termos do Hamiltoniano em Λ com condições de fronteira livre, olhando apenas as ligações internas a Λ e adicionando um termo que é da ordem da fronteira de Λ . Em outras palavras,

$$H_\Lambda^\eta = H_\Lambda^\varnothing + R_\Lambda,$$

onde R_Λ , analisando como anteriormente, é tal que $|R_\Lambda| \leq 2d\beta|\partial^{in}\Lambda|$. Assim, concluímos facilmente que

$$e^{-\beta 2d|\partial^{in}\Lambda|} \mathbf{Z}_\Lambda^\varnothing \leq \mathbf{Z}_\Lambda^\eta \leq e^{\beta 2d|\partial^{in}\Lambda|} \mathbf{Z}_{\Lambda_n}^\varnothing.$$

E aplicando isso para cada subconjunto Λ que converge a \mathbb{Z}^d no sentido de Van Hove, concluímos

que $\lim_{\Lambda \uparrow \mathbb{Z}^d} \psi_\Lambda^\eta = \lim_{\Lambda \uparrow \mathbb{Z}^d} \psi_\Lambda^\emptyset = \psi$. Isso conclui o teorema. ■

Na seção seguinte demonstraremos uma identidade, conhecida como identidade de Penrose, que tem um papel muito importante para a teoria ao se estimar a soma sobre grafos conexos

$$\sum_{g \in G_n} \prod_{\{i,j\} \in E_g} (e^{-\beta V(x_i, x_j)} - 1).$$

Em seguida enunciaremos e provaremos um outro resultado que permite limitar a soma sobre grafos conexos por uma soma sobre árvores, o que é conveniente do ponto de vista de contagem, uma vez que o número de grafos conexos é maior do que o de árvores. Com o intuito de demonstrarmos essa identidade, começaremos estabelecendo algumas notações e obtendo alguns resultados particulares que nos levarão a obter a identidade em questão. Esse resultado para a soma sobre grafos será usado em outras partes da dissertação com destaque para o Capítulo 5, onde discutiremos o modelo Blume-Emery-Griffiths e apresentamos um resultado a respeito deste modelo.

Denotemos por $[n]$ o conjunto $\{1, 2, \dots, n\}$ e $E_n \doteq \{\{i, j\} : i, j \in [n], i < j\}$. G_n denotará o conjunto de todos os grafos conexos com vértices no conjunto $[n]$, T_n as árvores rotuladas com vértices em $[n]$ e E_g os elos de $g \in G_n$. Note que, (G_n, \subset) é parcialmente ordenado onde $g \subset g'$ se g é um subgrafo de g' , isto é, $E_g \subset E_{g'}$. Dados $g, g' \in G_n$, com $g \subset g'$, o conjunto $[g, g'] = \{g'' \in G_n : g \subset g'' \subset g'\}$ é chamado um intervalo em (G_n, \subset) .

Provaremos a identidade de Penrose a seguir, baseados na existência de um mapeamento de T_n para G_n , chamado de *partição esquema*.

2.3 Identidade Grafo-árvore de Penrose

Definição 2.15. Um mapeamento $M : T_n \rightarrow G_n$ é chamado uma partição esquema do conjunto G_n se, para todo $\tau \in T_n$, tivermos $\tau \subset M(\tau)$ (como subgrafo) e $G_n = \dot{\cup}_{\tau \in T_n} [\tau, M(\tau)]$.

Teorema 2.4. (*Identidade Geral de Penrose*) Sejam V um potencial em pares e $n \geq 2$. Seja $M : T_n \rightarrow G_n$ uma partição esquema de G_n . Então, para todo $(x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{Z}^{dn}$, a seguinte identidade é válida,

$$\sum_{g \in G_n} \prod_{\{i,j\} \in E_g} (e^{-\beta V(x_i, x_j)} - 1) = \sum_{\tau \in T_n} \prod_{\{i,j\} \in E_\tau} (e^{-\beta V(x_i, x_j)} - 1) e^{-\beta \sum_{\{i,j\} \in E_{M(\tau)} \setminus E_\tau} V(x_i, x_j)}.$$

Demonstração: Seja $V_{ij} = \beta V(x_i, x_j)$. Uma vez que M é uma partição esquema, temos

$G_n = \dot{\cup}_{\tau \in T_n} [\tau, M(\tau)]$ e assim

$$\begin{aligned}
\sum_{g \in G_n} \prod_{\{i,j\} \in E_g} (e^{-V_{ij}} - 1) &= \sum_{\tau \in T_n} \sum_{g \in [\tau, M(\tau)]} \prod_{\{i,j\} \in E_g} (e^{-V_{ij}} - 1) \\
&= \sum_{\tau \in T_n} \prod_{\{i,j\} \in E_\tau} (e^{-V_{ij}} - 1) \sum_{g \in (\tau, M(\tau))} \prod_{\{i,j\} \in E_g \setminus E_\tau} (e^{-V_{ij}} - 1) \\
&= \sum_{\tau \in T_n} \prod_{\{i,j\} \in E_\tau} (e^{-V_{ij}} - 1) \sum_{E \subset E_{M(\tau)} \setminus E_\tau} \prod_{\{i,j\} \in E} (e^{-V_{ij}} - 1) \quad (2.7) \\
&= \sum_{\tau \in T_n} \prod_{\{i,j\} \in E_\tau} (e^{-V_{ij}} - 1) \prod_{\{i,j\} \in E_{M(\tau)} \setminus E_\tau} [(e^{-V_{ij}} - 1) + 1] \\
&= \sum_{\tau \in T_n} \prod_{\{i,j\} \in E_\tau} (e^{-V_{ij}} - 1) e^{-\sum_{\{i,j\} \in E_{M(\tau)} \setminus E_\tau} V_{ij}},
\end{aligned}$$

onde em (2.7) usamos o fato que a cada grafo g está associado um conjunto de elos E . ■

Decorre desse teorema o seguinte resultado,

Corolário 2.1. *Sejam V um potencial em pares e $n \geq 2$. Seja $M : T_n \rightarrow G_n$ uma partição esquema de G_n . Então, para todo $(x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{Z}^{dn}$, a seguinte desigualdade é válida,*

$$\left| \sum_{g \in G_n} \prod_{\{i,j\} \in E_g} (e^{-\beta V(x_i, x_j)} - 1) \right| \leq \sum_{\tau \in T_n} \prod_{\{i,j\} \in E_\tau} \left(1 - e^{-\beta |V(x_i, x_j)|}\right) e^{-\beta \sum_{\{i,j\} \in E_{M(\tau)} \setminus E_\tau^+} V(x_i, x_j)},$$

onde $E_\tau^+ = \{\{i, j\} \in E_\tau : V(x_i, x_j) \geq 0\}$.

Demonstração: Usando a identidade do teorema anterior, ainda fazendo $V_{ij} = \beta V(x_i, x_j)$, temos

$$\left| \sum_{g \in G_n} \prod_{\{i,j\} \in E_g} (e^{-V_{ij}} - 1) \right| \leq \sum_{\tau \in T_n} \prod_{\{i,j\} \in E_\tau} |(e^{-V_{ij}} - 1)| e^{-\sum_{\{i,j\} \in E_{M(\tau)} \setminus E_\tau} V_{ij}}. \quad (2.8)$$

Como $E_\tau = E_\tau^+ \dot{\cup} (E_\tau \setminus E_\tau^+)$, obtemos que

$$\begin{aligned}
\prod_{\{i,j\} \in E_\tau} |(e^{-V_{ij}} - 1)| &= \prod_{\{i,j\} \in E_\tau^+} |(e^{-V_{ij}} - 1)| \prod_{\{i,j\} \in E_\tau \setminus E_\tau^+} |(e^{-V_{ij}} - 1)| \\
&= \prod_{\{i,j\} \in E_\tau^+} (1 - e^{-V_{ij}}) \prod_{\{i,j\} \in E_\tau \setminus E_\tau^+} (e^{-V_{ij}} - 1) \\
&= \prod_{\{i,j\} \in E_\tau^+} (1 - e^{-V_{ij}}) \prod_{\{i,j\} \in E_\tau \setminus E_\tau^+} (1 - e^{V_{ij}}) e^{-V_{ij}} \\
&= \prod_{\{i,j\} \in E_\tau^+} (1 - e^{-V_{ij}}) \prod_{\{i,j\} \in E_\tau \setminus E_\tau^+} (1 - e^{V_{ij}}) \prod_{\{i,j\} \in E_\tau \setminus E_\tau^+} e^{-V_{ij}}.
\end{aligned}$$

Observando agora que, se $\{i, j\} \in E_\tau^+$, temos $V_{ij} = |V_{ij}|$ e que, por outro lado, se

$\{i, j\} \in E_\tau \setminus E_\tau^+$, temos que $V_{ij} = -|V_{ij}|$. Chegamos na seguinte expressão

$$\begin{aligned} \prod_{\{i,j\} \in E_\tau} |(e^{-V_{ij}} - 1)| &= \prod_{\{i,j\} \in E_\tau^+} (1 - e^{-|V_{ij}|}) \prod_{\{i,j\} \in E_\tau \setminus E_\tau^+} (1 - e^{-|V_{ij}|}) \prod_{\{i,j\} \in E_\tau \setminus E_\tau^+} e^{-V_{ij}} \\ &= \prod_{\{i,j\} \in E_\tau} (1 - e^{-|V_{ij}|}) \prod_{\{i,j\} \in E_\tau \setminus E_\tau^+} e^{-V_{ij}} \\ &= \prod_{\{i,j\} \in E_\tau} (1 - e^{-|V_{ij}|}) e^{-\sum_{\{i,j\} \in E_\tau \setminus E_\tau^+} V_{ij}}. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Uma vez que $(E_{M(\tau)} \setminus E_\tau) \cup (E_\tau \setminus E_\tau^+) = E_{M(\tau)} \setminus E_\tau^+$, vale que

$$e^{-\sum_{\{i,j\} \in E_\tau \setminus E_\tau^+} V_{ij}} e^{-\sum_{\{i,j\} \in E_{M(\tau)} \setminus E_\tau} V_{ij}} = e^{-\sum_{\{i,j\} \in E_{M(\tau)} \setminus E_\tau^+} V_{ij}} \quad (2.10)$$

Substituindo (2.9) e (2.10) na expressão do lado direito da desigualdade (2.8),

$$\sum_{\tau \in T_n} \prod_{\{i,j\} \in E_\tau} |(e^{-V_{ij}} - 1)| e^{-\sum_{\{i,j\} \in E_{M(\tau)} \setminus E_\tau} V_{ij}} = \sum_{\tau \in T_n} \prod_{\{i,j\} \in E_\tau} (1 - e^{-|V_{ij}|}) e^{-\sum_{\{i,j\} \in E_{M(\tau)} \setminus E_\tau^+} V_{ij}},$$

concluindo a afirmação do corolário. ■

Nosso objetivo agora é encontrar um tal mapeamento *partição esquema* M do conjunto G_n de modo que possamos limitar o termo

$$\exp \left\{ -\beta \sum_{\{i,j\} \in E_{M(\tau)} \setminus E_\tau^+} V(x_i, x_j) \right\}.$$

Em geral, não é fácil verificar se um mapeamento $M : T_n \rightarrow G_n$ é uma partição esquema. Então construiremos tal mapeamento a partir de um mapeamento auxiliar $T : G_n \rightarrow T_n$ e baseados na seguinte proposição:

Proposição 2.1. *As seguintes afirmações são equivalentes:*

1. *Existem dois mapeamentos*

$$G_n \xrightarrow{T} T_n \text{ e } T_n \xrightarrow{M} G_n,$$

tais que $T^{-1}(\tau) = \{g \in G_n : \tau \subset g \subset M(\tau)\}$, *para toda* $\tau \in T_n$.

2. *M é uma partição esquema de G_n .*

Demonstração: Vamos mostrar inicialmente que 1 \implies 2. Temos que $g \in T^{-1}(T(g))$ o que implica $T(g) \subset g$, para todo $g \in G_n$. Em particular, qualquer árvore $\tau \in G_n$ e, portanto $T(\tau) \subset \tau$. Como ambas são árvores, temos necessariamente que $T(\tau) = \tau$, ou seja, $\tau \in T^{-1}(\tau)$. Esta relação implica $\tau \subset M(\tau)$ e que T é sobrejetiva, assim os intervalos $T^{-1}(\tau)$ são não vazios e $G_n = \dot{\cup}_{\tau \in T_n} T^{-1}(\tau) = \dot{\cup}_{\tau \in T_n} [\tau, M(\tau)]$. Da Definição 2.15, temos que M é um partição esquema em G_n .

Mostremos agora que 2 \implies 1. Supondo $M : T_n \rightarrow G_n$ uma partição esquema, temos que $G_n = \dot{\cup}_{\tau \in T_n} [\tau, M(\tau)]$. Assim, para cada $g \in G_n$, existe uma única árvore $\tau \in T_n$ tal que $g \in [\tau, M(\tau)]$. Basta definir $T : G_n \rightarrow T_n$ de modo que $T(g) = \tau, \forall g \in [\tau, M(\tau)]$. ■

Construiremos inicialmente o mapeamento $T : G_n \longrightarrow T_n$.

Para $(x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{Z}^{dn}$ fixada e um potencial em pares V , munimos E_n de uma relação de ordem total dizendo que $\{i, j\} \succ \{k, l\} \implies V(x_i, x_j) \geq V(x_k, x_l)$. Usando esta relação, podemos associar a cada grafo $g \in G_n$ uma árvore geradora mínima $T(g)$ baseados no algoritmo de Kruskal. Por esse algoritmo, $T(g)$ é a árvore gerada de g escolhendo seus elos no conjunto E_g tal que, a cada passo, escolhe-se o elo de menor peso, através da relação \succ , de modo que não tenhamos ciclos. Caso tenhamos elos com mesmo peso, escolhe-se aquele cujo índice lexicográfico seja o menor. Na Figura 2.9, supondo que $V_1 \leq V_2 \leq V_3 \leq V_4 \leq V_5$, temos que os elos $\{1, 2\}$, $\{3, 6\}$ e $\{4, 5\}$, no grafo conexo dado em (1), têm mesmo peso V_1 e escolhemos inicialmente o elo $\{1, 2\}$, em seguida $\{3, 6\}$ e então escolhemos $\{4, 5\}$, como mostrado em (2). Como não resta elos com peso V_1 , escolhemos agora o de peso V_2 e, uma vez que não queremos que hajam ciclos, devemos isolar o elo $\{2, 6\}$. Agora escolhemos elos de peso V_3 que, por $\{2, 6\}$ não poder ser escolhido, só nos resta o elo $\{1, 4\}$, veja a Figura 2.9–(4). Novamente, para que não haja ciclos, devemos isolar os elos $\{2, 5\}$ e $\{3, 5\}$, como mostrado em (5) da figura e, por fim, escolhemos o elo de menor peso entre os elos restantes que é $\{2, 7\}$, como mostrado em (6). Caso tivéssemos igualdade de pesos para elos partindo de um mesmo vértice, por exemplo $\{2, 3\}$ e $\{2, 5\}$ escolheríamos o elo no qual o segundo vértice tenha menor rótulo, isto é, $\{2, 3\}$. Dito isso, podemos dar a seguinte observação:

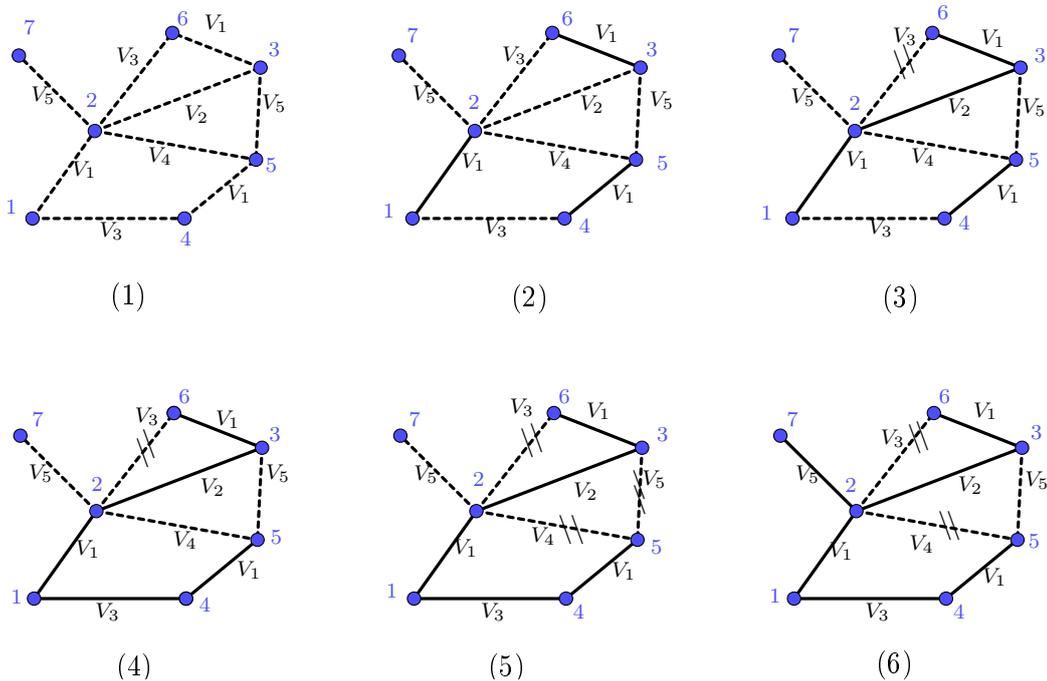


Figura 2.9: Gerando a árvore $T(g)$ a partir do grafo g .

Observação 2.1. O mapeamento $T : G_n \longrightarrow T_n$ associa a qualquer grafo $g \in G_n$ sua árvore geradora mínima $T(g)$ com relação \succ via o algoritmo de Kruskal.

Agora definimos o mapeamento M :

Definição 2.16. $M : T_n \longrightarrow G_n$ é tal que $M(\tau)$ é o grafo cujos elos $\{i, j\}$ são tais que $\{i, j\} \succ \{k, l\}$ para todo $\{k, l\} \in E_\tau$ no caminho de i até j .

Assim, temos os mapeamentos entre T_n e G_n e note ainda que $\tau \subset M(\tau)$ e que $T(g) \subset g$. Vamos verificar agora que esses mapeamentos satisfazem às hipóteses da Proposição 2.1.

Lema 2.2. *Sejam T e M dados nas definições acima. Então, para qualquer $\tau \in T_n$,*

$$T^{-1}(\tau) = \{g \in G_n : \tau \subset g \subset M(\tau)\},$$

e assim, M é uma partição esquema de G_n .

Demonstração: Seja $A = \{g \in G_n : \tau \subset g \subset M(\tau)\}$. Vamos mostrar que $T^{-1}(\tau) \subset A$ e que $A \subset T^{-1}(\tau)$, obtendo a igualdade dos conjuntos.

Seja $g \in T^{-1}(\tau)$, temos que $\tau = T(g)$ e pela observação feita no final da definição de M , $T(g) \subset g$.

Afirmamos que $g \subset M(\tau)$. De fato, tome $\{i, j\} \in E_g \setminus E_\tau$ e $e \in E_\tau$, qualquer elo em τ entre i e j . Substituindo e por $\{i, j\}$ em τ obtemos um grafo conexo τ' com $n - 1$ elos, ou seja, uma árvore. Como, τ é a árvore mínima geradora de g , devemos ter que $\{i, j\} \succ e$. Assim, por definição de $M(\tau)$, temos que $\{i, j\}$ é um elo de $M(\tau)$ e, portanto, $g \subset M(\tau)$.

Por outro lado, suponhamos que $g \in A$ e $\tau \subset g \subset M(\tau)$ e devemos mostrar que $T(g) = \tau$. Basta então mostrar que $T(g) \subset \tau$ e usar o fato que ambas são árvores em T_n . Procedemos por contradição na minimalidade de $T(g)$. Seja $\{i, j\} \in E_{T(g)} \setminus E_\tau$ e consideremos o caminho $p^\tau(\{i, j\})$ em τ ligando i à j . Como $T(g) \subset M(\tau)$, temos que $\{i, j\} \succ \{k, l\}$ para todo $\{k, l\} \in p^\tau(\{i, j\})$. Se removemos $\{i, j\}$ de $T(g)$, a árvore $T(g)$ se fatora em duas árvores e necessariamente, ao menos um dos elos de $p^\tau(\{i, j\})$ liga um vértice de uma árvore com um vértice de outra, pois do contrário, τ seria desconexa. Assim, adicionando esse elo, obtemos um grafo conexo com $n - 1$ elos, uma nova árvore com um elo menor que $\{i, j\}$, contradizendo a minimalidade de $T(g)$. Assim, temos que $E_{T(g)} = E_\tau$, ou seja $T(g) = \tau$, como queríamos.

Temos as duas continências demonstradas e com isso M é uma partição esquema de G_n . ■

Os últimos ingredientes para completar nosso objetivo nesta seção são a definição e o lema a seguir:

Definição 2.17. Dizemos que $V(x_i, x_j)$ é um potencial estável se existe uma função $B(x) \geq 0$ tal que, para todo $n \in \mathbb{N}$ e todo $(x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{Z}^{dn}$, vale

$$\sum_{1 \leq i < j \leq n} V(\gamma_i, \gamma_j) \geq - \sum_{i=1}^n B(\gamma_i).$$

Lema 2.3. *Sejam $V : \mathbb{Z}^{dn} \times \mathbb{Z}^{dn} \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ um potencial em pares estável com constante de estabilidade B e $\tau \in T_n$. Então, para qualquer $(x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{Z}^{dn}$, vale*

$$\sum_{\{i, j\} \in E_{M(\tau)} \setminus E_\tau^+} V(x_i, x_j) \geq -Bn, \quad (2.11)$$

onde $M(\tau)$ é o grafo dado na Definição 2.16 e $E_\tau^+ = \{\{i, j\} \in E_\tau : V(x_i, x_j) \geq 0\}$.

Demonstração: Denotemos $V_{ij} = V(x_i, x_j)$. Uma vez que τ é uma árvore, o conjunto de elos $E_\tau \setminus E_\tau^+$ forma um conjunto de árvores menores que chamaremos de floresta $\{\tau_1, \dots, \tau_k\}$. Seja ν_{τ_s} o conjunto de vértices da árvore τ_s , na floresta obtida.

Assumindo que $i \in \nu_{\tau_a}$ e $j \in \nu_{\tau_b}$, temos dois casos a analisar, a saber, $a \neq b$ e $a = b$.

Se $a \neq b$, o caminho que liga i a j deve conter ao menos um elo $e \in E_{\tau}^+$. Se além disso $\{i, j\} \in E_{M(\tau)}$, temos que $\{i, j\} \succ e \implies V_{ij} \geq V_e \geq 0$ e podemos descartar esse elo pois a soma sem ele já é menor que o considerando.

Se por outro lado $a = b$, o caminho ligando i a j está totalmente contido em ν_{τ_a} . Além disso, se $\{i, j\} \notin E_{M(\tau)}$, deve existir ao menos um elo $e \in \tau_a$ no caminho, tal que $\{i, j\} \prec e \implies V_{ij} \leq V_e \leq 0$ e este elo podemos considerar na soma, pois se a desigualdade vale com ele, que subtrai a soma do lado esquerdo, por mais forte razão será válida sem considerá-lo, de modo que podemos somar sobre todos os elos presentes em τ_a .

Assim, temos que

$$\sum_{\{i,j\} \in E_{M(\tau)} \setminus E_{\tau}^+} V_{ij} \geq \sum_{s=1}^k \sum_{\{i,j\} \in \nu_{\tau_s}} V_{ij} \geq \sum_{s=1}^k -|\nu_{\tau_s}|B = -Bn,$$

na segunda desigualdade usamos o fato de V ser estável (Definição 3.2). ■

Agora estamos prontos para enunciar o resultado mais importante desta seção, cuja prova decorre imediatamente do Corolário 2.1 e do Lema 2.3.

Proposição 2.2. *Seja V um potencial estável com constante de estabilidade B . Então, para todo $n \geq 2$ e qualquer $(x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{Z}^{dn}$, a seguinte desigualdade é válida,*

$$\left| \sum_{g \in G_n} \prod_{\{i,j\} \in E_g} (e^{-\beta V(x_i, x_j)} - 1) \right| \leq e^{\beta n B} \sum_{\tau \in T_n} \prod_{\{i,j\} \in E_{\tau}} (1 - e^{-\beta |V(x_i, x_j)|}).$$

Capítulo 3

Expansão em Polímeros

Este capítulo é dedicado a discussão da técnica expansão em polímeros que desempenha um papel muito importante na mecânica estatística no estudo dos fenômenos de transição de fase. A teoria discutida aqui é essencialmente baseada nas referências [7] e [19]. Iniciaremos nosso estudo com o modelo de *gás de polímeros abstrato* e o trataremos em um contexto mais geral assumindo que a interação entre polímeros é dada por um potencial em pares. Ele foi originariamente introduzido por Gruber e Kunz em 1971. No artigo original, os polímeros eram subconjuntos finitos da rede cúbica d -dimensional. Em 1986, Kotecký e Preiss [11] propuseram uma generalização do modelo no qual os polímeros eram simplesmente elementos pertencentes a um conjunto enumerável \mathcal{P} , cuja única estrutura era constituída por uma relação simétrica e reflexiva em \mathcal{P} , que eles chamaram de relação de incompatibilidade.

No modelo do gás de polímeros, o objetivo é encontrar uma representação da pressão como uma série em termos dos polímeros e analisar sua convergência. Conhecendo a atividade de cada polímero, buscamos critérios para controlar esta série e assim garantir a analiticidade da pressão termodinâmica do modelo. Os critérios que estudaremos nessa dissertação são os critérios de Kotecký-Preis (KP), Dobrushin (Dob) e critério de Fernández-Procacci (FP).

3.1 Gás de Polímeros Abstrato

Seja \mathcal{P} um conjunto enumerável cujos elementos são chamados polímeros. Entenderemos polímeros como entes geométricos que dependem da configuração que estamos considerando, no decorrer do texto esse conceito ficará mais claro. Temos então,

$$\mathcal{P} = \{\gamma : \gamma \text{ é um polímero possível}\}.$$

A cada polímero $\gamma \in \mathcal{P}$ associamos um número complexo z_γ que será chamada *atividade do polímero* γ .

Denotaremos $z = \{z_\gamma\}_{\gamma \in \mathcal{P}}$ uma sequência de atividades de polímeros em \mathcal{P} e para um subconjunto $\Lambda \subset \mathcal{P}$, $z_\Lambda = \{z_\gamma\}_{\gamma \in \Lambda}$.

Um *potencial em pares* é uma função $V : \mathcal{P} \times \mathcal{P} \rightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$. Em geral polímeros interagem através de um potencial em pares. A saber, a energia E de uma configuração de n polímeros

$\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n$ é dada pela expressão

$$E(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) = \sum_{1 \leq i < j \leq n} V(\gamma_i, \gamma_j),$$

onde $V(\gamma_i, \gamma_j)$ é uma função simétrica. Uma tal função induz sobre \mathcal{P} uma relação \mathcal{R}_V . A saber, o par $(\gamma_i, \gamma_j) \in \mathcal{R}_V \Leftrightarrow V(\gamma_i, \gamma_j) = +\infty$. Uma vez que V é uma função simétrica, teremos que a relação induzida será simétrica, ou seja, $V(\gamma_i, \gamma_j) = V(\gamma_j, \gamma_i) = +\infty$. Para estabelecer notação, se $(\gamma_i, \gamma_j) \in \mathcal{R}_V$ escreveremos $\gamma_i \approx \gamma_j$ e dizemos que γ_i, γ_j são incompatíveis. Se, por outro lado, $(\gamma_i, \gamma_j) \notin \mathcal{R}_V$ dizemos que os polímeros são compatíveis e escrevemos $\gamma_i \sim \gamma_j$. Se V é tal que a relação \mathcal{R}_V é reflexiva, então $\gamma \approx \gamma, \forall \gamma \in \mathcal{P}$; ou seja, $V(\gamma, \gamma) = +\infty$.

Definição 3.1. A relação \mathcal{R}_V induzida por V é dita *relação de incompatibilidade*.

Seja $\Lambda \subset \mathcal{P}$ finito e fixado (“volume” de um gás). Para $z_\gamma \geq 0$, a probabilidade de vermos a configuração de n polímeros $(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \Lambda^n$ é dada por

$$Prob(\gamma_1, \dots, \gamma_n) = \frac{1}{\Xi_\Lambda} z_{\gamma_1} z_{\gamma_2} \dots z_{\gamma_n} e^{-\sum_{1 \leq i < j \leq n} V(\gamma_i, \gamma_j)}, \quad (3.1)$$

onde o fator de normalização Ξ_Λ é a função de partição grã-canônica no volume Λ dada por

$$\Xi_\Lambda(z_\Lambda) = 1 + \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \Lambda^n} z_{\gamma_1} z_{\gamma_2} \dots z_{\gamma_n} e^{-\sum_{1 \leq i < j \leq n} V(\gamma_i, \gamma_j)}. \quad (3.2)$$

Observação 3.1. Para $(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n)$ onde existe algum par γ_i, γ_j incompatível, temos que $Prob(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) = 0$, já que $V(\gamma_i, \gamma_j) = +\infty$ e portanto $e^{-\sum_{1 \leq i < j \leq n} V(\gamma_i, \gamma_j)} = 0$. Significa que n -uplas dessa natureza são proibidas.

Definição 3.2. $V(\gamma_i, \gamma_j)$ é dito ser um potencial estável se existe uma função $B(\gamma) \geq 0$ tal que, para todo $n \in \mathbb{N}$ e todo $(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n$

$$\sum_{1 \leq i < j \leq n} V(\gamma_i, \gamma_j) \geq -\sum_{i=1}^n B(\gamma_i). \quad (3.3)$$

Note que a definição acima nos permite, em princípio, desacoplar os polímeros. Observemos ainda que se existe algum par γ_i, γ_j incompatível, teremos que $V(\gamma_i, \gamma_j) = +\infty$ e a desigualdade acima é satisfeita naturalmente. A próxima definição nos dá uma condição mais forte que a definição anterior.

Definição 3.3. Diremos que um potencial $V(\gamma_i, \gamma_j)$ é ultra-estável quando existir uma função $B(\gamma) \geq 0$ tal que, para todo $n \in \mathbb{N}$ e toda n -upla $(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n$, *não contendo pares incompatíveis*, temos que:

$$\sum_{j=2}^n V(\gamma_1, \gamma_j) \geq -2B(\gamma_1). \quad (3.4)$$

Definição 3.4. Diremos que um potencial $V(\gamma_i, \gamma_j)$ é repulsivo se para todo $(\gamma, \gamma') \in \mathcal{P} \times \mathcal{P}$,

$$V(\gamma, \gamma') \geq 0. \quad (3.5)$$

Definição 3.5. Diremos que um potencial $V(\gamma_i, \gamma_j)$ é puramente *hard core*, se a relação de incompatibilidade \mathcal{R}_V , induzida por V , é reflexiva e $V(\gamma, \gamma') = 0$ para todos os pares $(\gamma, \gamma') \notin \mathcal{R}_V$, ou seja, os pares compatíveis $\gamma \sim \gamma'$.

Observação 3.2. Um potencial repulsivo é ultra estável, pois se $V(\gamma, \gamma') \geq 0$, temos que $\sum_{j=2}^n V(\gamma_i, \gamma_j) \geq -2B(\gamma_1)$, bastando tomar $B(\gamma_1) = 0$.

Observação 3.3. Todo potencial ultra-estável é estável, pois

$$\sum_{1 \leq i < j \leq n} V(\gamma_i, \gamma_j) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \left(\sum_{\substack{j \in I_n \\ i \neq j}} V(\gamma_i, \gamma_j) \right) \geq \frac{1}{2} \left(-2 \sum_{i=1}^n B(\gamma_i) \right) = - \sum_{i=1}^n B(\gamma_i), \quad (3.6)$$

onde usamos a Definição 3.3 para obter a desigualdade .

Note que a condição de estabilidade implica que Ξ_Λ é (absolutamente) convergente pois,

$$\begin{aligned} & 1 + \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \Lambda^n} |z_{\gamma_1}| |z_{\gamma_2}| \dots |z_{\gamma_n}| e^{-\sum_{1 \leq i < j \leq n} V(\gamma_i, \gamma_j)} \\ & \leq 1 + \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \Lambda^n} |z_{\gamma_1}| |z_{\gamma_2}| \dots |z_{\gamma_n}| \prod_{i=1}^n e^{B(\gamma_i)} \\ & = 1 + \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \prod_{i=1}^n \sum_{\gamma_i \in \Lambda} |z_{\gamma_i}| e^{B(\gamma_i)} \\ & = 1 + \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \left[\sum_{\gamma \in \Lambda} |z_\gamma| e^{B(\gamma)} \right]^n \\ & = \exp \left(\sum_{\gamma \in \Lambda} |z_\gamma| e^{B(\gamma)} \right) \\ & \leq \exp \left(|\Lambda| \max_{\gamma \in \Lambda} \{ |z_\gamma| e^{B(\gamma)} \} \right). \end{aligned} \quad (3.7)$$

Em particular,

$$|\Xi_\Lambda(z_\Lambda)| \leq \exp \left(|\Lambda| \max_{\gamma \in \Lambda} \{ |z_\gamma| e^{B(\gamma)} \} \right). \quad (3.8)$$

Temos que a estabilidade implica que $\Xi_\Lambda(z)$ é analítica em todo $\mathbb{C}^{|\Lambda|}$, onde $|\Lambda|$ é a cardinalidade de Λ .

Definição 3.6. Definimos a função *pressão* (no volume finito $\Lambda \subset \mathcal{P}$) do gás de polímeros pela expressão

$$P_\Lambda(z_\Lambda) = \frac{1}{|\Lambda|} \log \Xi_\Lambda(z_\Lambda), \quad (3.9)$$

com $z_\Lambda := \{z_\gamma\}_{\gamma \in \Lambda}$.

Mostraremos que $P_\Lambda(z_\Lambda)$ converge quando $\Lambda \rightarrow \mathcal{P}$, onde $|z_\gamma| \leq \rho_\gamma$, com $\rho = \{\rho_\gamma\}_{\gamma \in \mathcal{P}}$ independente de Λ . Para isso, obteremos uma representação formal da função de partição Ξ_Λ

em termos de uma exponencial de uma soma, usando para isso um processo conhecido como expansão de Mayer do fator de Gibbs $e^{-\sum_{1 \leq i < j \leq n} V(\gamma_i, \gamma_j)}$. Ao fazermos isso, este será expresso em termos de grafos com vértices no conjunto $I_n = \{1, 2, \dots, n\}$. Ilustraremos o processo para $n = 3$ e o caso geral, quando n é arbitrário, é similar.

Exemplo 3.1. (Expansão do fator de Gibbs para $n = 3$) Fazendo $e^{-V(\gamma_i, \gamma_j)} - 1 = f_{ij}$, temos

$$\begin{aligned} e^{-\sum_{1 \leq i < j \leq 3} V(\gamma_i, \gamma_j)} &= \prod_{1 \leq i < j \leq 3} e^{-V(\gamma_i, \gamma_j)} = \prod_{1 \leq i < j \leq 3} \left[\left(e^{-V(\gamma_i, \gamma_j)} - 1 \right) + 1 \right] = \prod_{1 \leq i < j \leq 3} [f_{ij} + 1] \\ &= 1 + f_{12} + f_{13} + f_{23} + f_{12}f_{13} + f_{12}f_{23} + f_{13}f_{23} + f_{12}f_{13}f_{23} \\ &= 1 + \sum_{1 \leq i < j \leq 3} f_{ij} + \sum_{\substack{1 \leq i < j \leq 3 \\ 1 \leq r < s \leq 3: i < r \text{ ou } i=r \text{ e } j < s}} f_{ij}f_{rs} + \prod_{1 \leq i < j \leq 3} f_{ij}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Podemos associar a cada termo de (3.10) um grafo com vértice em $I_3 = \{1, 2, 3\}$ e ligações correspondentes aos pares $\{i, j\}$ provenientes dos produtos dos f_{ij} 's, veja Figura 3.1. À parcela 1 associamos o grafo vazio (sem ligações) isto é $E_g = \emptyset$. Com isso, podemos escrever

$$e^{-\sum_{1 \leq i < j \leq 3} V(\gamma_i, \gamma_j)} = \sum_{g \in \mathcal{G}_3} \prod_{\{i, j\} \in E_g} f_{ij} = \sum_{g \in \mathcal{G}_3} \prod_{\{i, j\} \in E_g} \left(e^{-V(\gamma_i, \gamma_j)} - 1 \right). \quad (3.11)$$

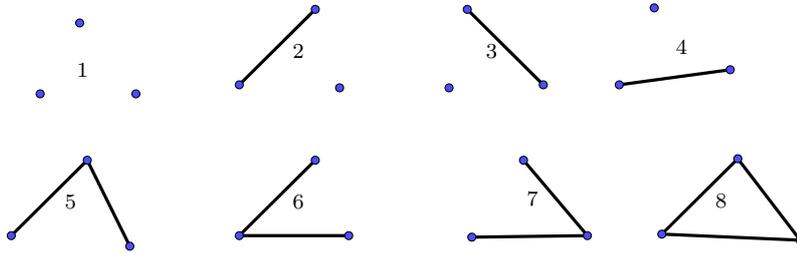


Figura 3.1: Grafos possíveis com 3 vértices.

Para n arbitrário, de maneira análoga, temos

$$\begin{aligned} e^{-\sum_{1 \leq i < j \leq n} V(\gamma_i, \gamma_j)} &= \prod_{1 \leq i < j \leq n} e^{-V(\gamma_i, \gamma_j)} \\ &= \prod_{1 \leq i < j \leq n} (1 + f_{ij}) \\ &= 1 + \sum_{1 \leq i < j \leq n} f_{ij} + \sum_{\substack{1 \leq i < j \leq n \\ 1 \leq r < s \leq n: i < r \text{ ou } i=r \text{ e } j < s}} f_{ij}f_{rs} + \dots + \prod_{1 \leq i < j \leq n} f_{ij}, \end{aligned}$$

e podemos associar cada termo que aparece na soma acima com uma soma sobre grafos possíveis g cujo conjunto de vértices é I_n e conjunto de elos E_g . Sendo então \mathcal{G}_n o conjunto de todos os grafos possíveis com vértice em I_n e elos E_g , convencionando que o grafo vazio contribui com 1, temos

$$e^{-\sum_{1 \leq i < j \leq n} V(\gamma_i, \gamma_j)} = \sum_{g \in \mathcal{G}_n} \prod_{\{i, j\} \in E_g} \left(e^{-V(\gamma_i, \gamma_j)} - 1 \right). \quad (3.12)$$

Uma pergunta que podemos nos fazer é quantos termos existem na soma sobre grafos em (3.12) e a resposta é que existirão tantos quantos forem os subconjuntos de pares no conjunto de vértices I_n . Como existem $\binom{n}{2} = \frac{n(n-1)}{2}$ eles, existem $2^{\frac{n(n-1)}{2}}$ subconjuntos de pares e portanto de grafos possíveis com n vértices.

Nós podemos ainda reescrever a soma do lado direito de (3.12) apenas em termos de grafos conexos. Para tal, iremos considerar partições do conjunto I_n em subconjuntos I_1, I_2, \dots, I_k de modo que $\cup_{j=1}^k I_j = I_n$ e $I_i \cap I_j = \emptyset, \forall i \neq j$ com cada $I_j \neq \emptyset$ e olhamos para os grafos conexos em cada I_j .

Observação 3.4. Note que cada grafo possível induz uma partição de I_n em componentes conexas.

Definamos a função,

$$\phi^T(I, \gamma_I) = \begin{cases} \sum_{g \in G_I} \prod_{\{i,j\} \in E_g} (e^{-V(\gamma_i, \gamma_j)} - 1), & \text{se } |I| > 1 \\ 1, & \text{se } |I| = 1 \end{cases},$$

onde G_I denota o conjunto dos grafos conexos em I e $\gamma_I = (\gamma_1, \dots, \gamma_{|I|})$.

Uma partição do conjunto I_n em n subconjuntos disjuntos deve ser tal que cada subconjunto tenha exatamente 1 elemento e deste modo $\phi^T = 1$. Para $n - 1$ subconjuntos, um deles deve ter cardinalidade 2. Digamos sem perda de generalidade que seja $|I_1| = 2$ e $|I_j| = 1, \forall j = 2, \dots, n - 1$. Desta maneira podemos ver que, para partições em n subconjuntos,

$$\sum_{\{I_1, I_2, \dots, I_n\}} \phi^T(I_1, \gamma_{I_1}) \phi^T(I_2, \gamma_{I_2}) \dots \phi^T(I_n, \gamma_{I_n}) = 1.$$

Para todas as partições em $n - 1$ subconjuntos, temos

$$\sum_{\{I_1, I_2, \dots, I_{n-1}\}} \phi^T(I_1, \gamma_{I_1}) \phi^T(I_2, \gamma_{I_2}) \dots \phi^T(I_{n-1}, \gamma_{I_{n-1}}) = \sum_{1 \leq i < j \leq n} (e^{-V(\gamma_i, \gamma_j)} - 1).$$

De modo geral, chamando Π_n o conjunto de todas as partições possíveis de I_n , podemos reescrever (3.12) em função de grafos conexos da seguinte forma,

$$e^{-\sum_{1 \leq i < j \leq n} V(\gamma_i, \gamma_j)} = \sum_{g \in \mathcal{G}_n} \prod_{\{i,j\} \in E_g} (e^{-V(\gamma_i, \gamma_j)} - 1) = \sum_{k=1}^n \sum_{\{I_1, I_2, \dots, I_k\} \subset \Pi_n} \prod_{j=1}^k \phi^T(I_j, \gamma_{I_j}). \quad (3.13)$$

Exemplo 3.2. (Voltando à $n = 3$ para soma sobre grafos conexos)

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^3 \sum_{\{I_1, I_2, \dots, I_k\} \subset \Pi_3} \prod_{j=1}^k \phi^T(I_j, \gamma_{I_j}) &= \sum_{I_1} \phi^T(I_1, \gamma_{I_1}) + \sum_{\{I_1, I_2\}} \phi^T(I_1, \gamma_{I_1}) \phi^T(I_2, \gamma_{I_2}) \\ &+ \sum_{\{I_1, I_2, I_3\}} \phi^T(I_1, \gamma_{I_1}) \phi^T(I_2, \gamma_{I_2}) \phi^T(I_3, \gamma_{I_3}). \end{aligned}$$

Olhando novamente a Figura 3.1, se necessário, vemos que

$$\sum_{I_1} \phi^T(I_1, \gamma_{I_1}) = f_{12}f_{13} + f_{12}f_{23} + f_{13}f_{23} + f_{12}f_{13}f_{23},$$

$$\sum_{\{I_1, I_2\}} \phi^T(I_1, \gamma_{I_1})\phi^T(I_2, \gamma_{I_2}) = f_{12} + f_{13} + f_{23}$$

e por fim,

$$\sum_{\{I_1, I_2, I_3\}} \phi^T(I_1, \gamma_{I_1})\phi^T(I_2, \gamma_{I_2})\phi^T(I_3, \gamma_{I_3}) = 1.$$

Seguindo que a equação (3.11) pode ser reescrita como,

$$e^{-\sum_{1 \leq i < j \leq 3} V(\gamma_i, \gamma_j)} = \sum_{k=1}^3 \sum_{\{I_1, I_2, \dots, I_k\} \in \Pi_3} \prod_{j=1}^k \phi^T(I_j, \gamma_{I_j}).$$

Voltando à nossa expressão geral e substituindo (3.13) na equação (3.2), obtemos

$$\begin{aligned} \Xi_\Lambda(z_\Lambda) &= 1 + \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \Lambda^n} z_{\gamma_1} z_{\gamma_2} \dots z_{\gamma_n} \sum_{k=1}^n \sum_{\{I_1, I_2, \dots, I_k\} \subset \Pi_n} \prod_{j=1}^k \phi^T(I_j, \gamma_{I_j}) \\ &= 1 + \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \sum_{k=1}^n \sum_{\{I_1, I_2, \dots, I_k\} \subset \Pi_n} \prod_{j=1}^k \left[\sum_{\gamma_{I_j} \in \Lambda^{|I_j|}} \phi^T(I_j, \gamma_{I_j}) \prod_{l \in I_j} z_{\gamma_l} \right]. \end{aligned}$$

Seja

$$\phi_{|I_j|}(z_\Lambda) \doteq \sum_{\gamma_{I_j} \in \Lambda^{|I_j|}} \phi^T(I_j, \gamma_{I_j}) \prod_{l \in I_j} z_{\gamma_l} = \sum_{(\gamma_1, \dots, \gamma_{|I_j|}) \in \Lambda^{|I_j|}} \phi^T(I_j, \gamma_1, \dots, \gamma_{|I_j|}) z_{\gamma_1} \dots z_{\gamma_{|I_j|}}.$$

Fixando as cardinalidades de k subconjuntos de uma partição de I_n , digamos $|I_1| = n_1$, $|I_2| = n_2, \dots$, $|I_k| = n_k$, temos que $\sum_{j=1}^k |I_j| = n_1 + \dots + n_k = n$. É possível contar quantas partições existem com essa característica. Este número é dado por:

$$C_{n, n_1} \cdot C_{n-n_1, n_2} \cdot \dots \cdot C_{n-n_1-n_2-\dots-n_{k-1}, n_k} = \frac{n!}{n_1! n_2! \dots n_k!}.$$

Para compensar o número de partições que são obtidas umas das outras por permutação de n_1, n_2, \dots, n_k , devemos introduzir o fator $1/k!$. Assim,

$$\sum_{\{I_1, I_2, \dots, I_k\} \subset \Pi_n} \prod_{j=1}^k \phi_{|I_j|}(z_\Lambda) = \frac{1}{k!} \sum_{\substack{n_1, n_2, \dots, n_k: n_i \geq 1 \\ n_1 + n_2 + \dots + n_k = n}} \prod_{j=1}^k \phi_{n_j}(z_\Lambda) \frac{n!}{n_1! n_2! \dots n_k!}.$$

Assim,

$$\begin{aligned}
\Xi_\Lambda(z_\Lambda) &= 1 + \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \sum_{k=1}^n \frac{1}{k!} \sum_{\substack{n_1, n_2, \dots, n_k: n_i \geq 1 \\ n_1 + n_2 + \dots + n_k = n}} \frac{n!}{n_1! n_2! \dots n_k!} \prod_{j=1}^k \phi_{n_j}(z_\Lambda) \\
&= 1 + \sum_{k \geq 1} \frac{1}{k!} \sum_{n=k}^{\infty} \sum_{\substack{n_1, n_2, \dots, n_k: n_i \geq 1 \\ n_1 + n_2 + \dots + n_k = n}} \prod_{j=1}^k \frac{\phi_{n_j}(z_\Lambda)}{n_j!} \\
&= 1 + \sum_{k \geq 1} \frac{1}{k!} \sum_{n_1=1}^{\infty} \sum_{n_2=1}^{\infty} \dots \sum_{n_k=1}^{\infty} \prod_{j=1}^k \frac{\phi_{n_j}(z_\Lambda)}{n_j!} \\
&= 1 + \sum_{k \geq 1} \frac{1}{k!} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\phi_n(z_\Lambda)}{n!} \right]^k. \tag{3.14}
\end{aligned}$$

Observação 3.5. Na segunda igualdade acima a troca nas variáveis dos somatórios é possível desde que tenhamos convergência de cada uma das séries $\sum_{n=k}^{\infty}(\dots)$, o que não é garantida em geral. Mas no nosso caso valerá, uma vez que tenhamos condições de convergência bem estabelecidas como é o objetivo desse capítulo.

Portanto, a equação (3.14) nos fornece

$$\Xi_\Lambda(z_\Lambda) = \exp \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\phi_n(z_\Lambda)}{n!} \right\},$$

onde

$$\phi_n(z_\Lambda) = \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \Lambda^n} \phi^T(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) z_{\gamma_1} \dots z_{\gamma_n}.$$

E obtemos assim

$$\log \Xi_\Lambda(z_\Lambda) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \Lambda^n} \phi^T(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) z_{\gamma_1} \dots z_{\gamma_n}, \tag{3.15}$$

com a função ϕ^T dada por

$$\phi^T(\gamma_1, \dots, \gamma_n) = \begin{cases} \sum_{g \in G_n} \prod_{\{i, j\} \in E_g} (e^{-V(\gamma_i, \gamma_j)} - 1), & \text{se } n \geq 2 \\ 1, & \text{se } n = 1 \end{cases}. \tag{3.16}$$

A equação (3.15) tem sentido apenas para $z \in \mathbb{C}^{\mathcal{P}}$ tais que a série formal do lado direito da igualdade seja absolutamente convergente. Para estudarmos a convergência absoluta dessa série, consideraremos para qualquer Λ , a série de termos positivos definida, para $\rho \in (0, \infty)^{\mathcal{P}}$ no polidisco $\{|z_\gamma| \leq \rho_\gamma\}_{\gamma \in \Lambda}$, por

$$|\log \Xi_\Lambda|(\rho_\Lambda) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \Lambda^n} |\phi^T(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n)| \rho_{\gamma_1} \dots \rho_{\gamma_n}.$$

Note que $|\log \Xi_\Lambda(z_\Lambda)| \leq |\log \Xi_\Lambda|(\rho_\Lambda)$. Isto nos diz que se provarmos que a série de termos

positivos converge a uma função $\rho = \{\rho_\gamma\}_{\gamma \in \mathcal{P}}$ teremos então provado que a série do $\log \Xi_\Lambda(z_\Lambda)$ converge absolutamente e, conseqüentemente, converge para qualquer Λ no polidisco.

Definindo, para um polímero γ_0 fixado, a função

$$|\Pi|_{\gamma_0}(\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n} |\phi^T(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n)| \rho_{\gamma_1} \dots \rho_{\gamma_n}, \quad (3.17)$$

teremos que, para todo polidisco $\{|z_\gamma| \leq \rho_\gamma\}_{\gamma \in \mathcal{P}}$,

$$\begin{aligned} |\log \Xi_\Lambda|(\rho_\Lambda) &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \Lambda^n} |\phi^T(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n)| \rho_{\gamma_1} \dots \rho_{\gamma_n} \\ &= \sum_{\gamma_0 \in \Lambda} \rho_{\gamma_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_{n-1}) \in \Lambda^{n-1}} |\phi^T(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_{n-1})| \rho_{\gamma_1} \dots \rho_{\gamma_{n-1}} \\ &\leq \sum_{\gamma_0 \in \Lambda} \rho_{\gamma_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n-1)!} \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_{n-1}) \in \mathcal{P}^{n-1}} |\phi^T(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_{n-1})| \rho_{\gamma_1} \dots \rho_{\gamma_{n-1}} \\ &= \sum_{\gamma_0 \in \Lambda} \rho_{\gamma_0} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n} |\phi^T(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)| \rho_{\gamma_1} \dots \rho_{\gamma_n} \\ &= \sum_{\gamma_0 \in \Lambda} \rho_{\gamma_0} |\Pi|_{\gamma_0}(\rho) \leq |\Lambda| \sup_{\gamma_0 \in \mathcal{P}} \{\rho_{\gamma_0} |\Pi|_{\gamma_0}(\rho)\}. \end{aligned}$$

Conseqüentemente,

$$|P_\Lambda(z_\Lambda)| = \frac{1}{|\Lambda|} |\log \Xi_\Lambda(z_\Lambda)| \leq \frac{1}{|\Lambda|} |\log \Xi_\Lambda|(\rho_\Lambda) \leq \sup_{\gamma_0 \in \mathcal{P}} \{\rho_{\gamma_0} |\Pi|_{\gamma_0}(\rho)\}.$$

Desta forma, se provarmos que a série $|\Pi|_{\gamma_0}(\rho)$ converge para alguma função $\rho \in (0, \infty)^{\mathcal{P}}$, estaremos provando que $|P_\Lambda(z_\Lambda)|$ converge e com isto a pressão será uniformemente convergente no volume Λ .

A seguir discutimos um caso específico de potencial, que em geral será o considerado para estudar a analiticidade do gás de polímeros e que aparece em muitos outros modelos.

3.2 Caso *Hard Core*

Da Definição 3.5, um potencial *hard core* é tal que $V(\gamma, \gamma') = 0, \forall \gamma \sim \gamma'$ e a relação de incompatibilidade induzida por $V : \mathcal{P} \times \mathcal{P} \rightarrow \{0, \infty\}$ é reflexiva, $\gamma \approx \gamma, \forall \gamma \in \mathcal{P}$, em outras palavras, $V(\gamma, \gamma) = \infty, \forall \gamma$. De maneira geral, na presença de um potencial *hard core* temos que se $(\gamma, \gamma') \in \mathcal{R}_V$ então $V(\gamma, \gamma') = \infty$ e escrevemos $\gamma \approx \gamma'$ significando que o par de polímeros é incompatível. Caso tenhamos que $(\gamma, \gamma') \notin \mathcal{R}_V$, necessariamente teremos $V(\gamma, \gamma') = 0$, dizemos que γ e γ' são compatíveis e escrevemos $\gamma \sim \gamma'$.

A função de Partição grã-canônica para o gás *hard core* é dada por

$$\Xi_\Lambda(z_\Lambda) = 1 + \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \Lambda^n} z_{\gamma_1} z_{\gamma_2} \dots z_{\gamma_n} e^{-\sum_{1 \leq i < j \leq n} V(\gamma_i, \gamma_j)}.$$

Esta função é naturalmente inteira em $\mathbb{C}^{|\Lambda|}$, pois como $V(\gamma, \gamma') \geq 0$, tem-se $e^{-\sum_{1 \leq i < j \leq n} V(\gamma_i, \gamma_j)} \leq 1$ e assim

$$|\Xi_\Lambda(z_\Lambda)| \leq 1 + \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \Lambda^n} |z_{\gamma_1}| |z_{\gamma_2}| \dots |z_{\gamma_n}| = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[\sum_{\gamma \in \Lambda} |z_\gamma| \right]^n.$$

Ou seja, $|\Xi_\Lambda(z_\Lambda)| \leq e^{\sum_{\gamma \in \Lambda} |z_\gamma|}$, que é um número fixo uma vez que tomamos Λ finito.

Dado uma n -upla de polímeros $(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n$ podemos definir o grafo $g(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{G}_n$ tendo elo $\{i, j\} \iff \gamma_i \approx \gamma_j$, ou seja, sempre que $(\gamma_i, \gamma_j) \in \mathcal{R}_V$. Mais adiante provaremos um resultado conhecido como *identidade de Penrose* que nos permitirá, para o caso *hard core* com $n \geq 2$, junto com a expressão

$$\phi^T(\gamma_1, \dots, \gamma_n) = \begin{cases} \sum_{g \in G_n : g \subset g(\gamma_1, \dots, \gamma_n)} (-1)^{|E_g|}, & \text{se } g(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in G_n \\ 0, & \text{se } g(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \notin G_n \end{cases},$$

escrever $\phi^T(\gamma_1, \dots, \gamma_n)$ como

$$\phi^T(\gamma_1, \dots, \gamma_n) = (-1)^{n-1} \sum_{\substack{\tau \in T_n : \tau \subset g(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \\ p(\tau) = \tau}} 1,$$

quando $g(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in G_n$. Acima, T_n denota o conjunto de todas as árvores com vértices em I_n .

Usando grafos árvores, obteremos a identidade de Penrose para um potencial *hard core*. Seja T_n^0 o conjunto de todas as árvores rotuladas enraizadas com vértices em $\{0, 1, 2, \dots, n\}$ cuja raiz é escolhida como sendo 0. Para cada árvore rotulada $\tau \in T_n^0$ nós podemos associar um desenho no plano e o chamaremos *árvore plana enraizada* associado a τ . Obtemos o desenho de τ colocando os pais à esquerda dos filhos, começando da raiz, e em seguida ordenando os filhos de cima para baixo com ordem coerente aos seus respectivos níveis. Na Figura 3.2, as árvores com 5 vértices ($n+1=5$) (i) com elos $\{0,2\}$, $\{1,2\}$, $\{2,4\}$, $\{3,4\}$, (ii) com elos $\{0,3\}$, $\{2,3\}$, $\{3,4\}$, $\{1,2\}$ e (iii) com elos $\{0,1\}$, $\{0,4\}$, $\{1,2\}$, $\{1,3\}$ o desenho das árvores planas enraizadas são dadas.

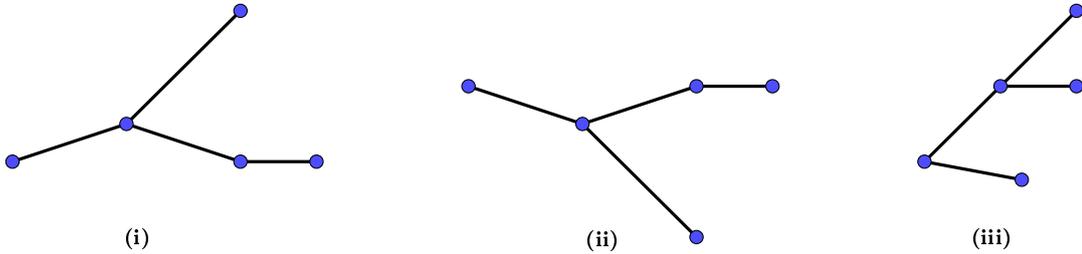


Figura 3.2

Aqui se faz necessário chamar atenção ao fato que, devido à regra de ordenamento dos filhos de cima para baixo, as árvores planas enraizadas (i) e (ii) são consideradas distintas embora se tratando de árvores seriam essencialmente a mesma, realizando uma rotação no plano.

A partir disso, podemos definir um mapeamento $m : \tau \mapsto m(\tau)$, que associa a cada árvore

enraizada $\tau \in T_n^0$ um único desenho $t = m(\tau)$ que é chamado *árvore plana enraizada* (a unicidade advém do ordenamento). O conjunto de todas as árvores planas enraizadas com n vértices será denotado por \mathcal{T}_n^0 e o conjunto de árvores planas enraizadas com número de geração máximo igual a k denotamos por $\mathbb{T}^{0,k}$. Note que $\cup_{k \geq 0} \mathbb{T}^{0,k} = \cup_{n \geq 0} \mathcal{T}_n^0$ e a esta igualdade chamamos de \mathcal{T}^0 , o conjunto de todas as árvores planas enraizadas. Um elemento $t \in \mathcal{T}_n^0$ pode ser visto ainda como uma classe de equivalência no conjunto T_n^0 com a seguinte relação: dados $\tau, \tau' \in T_n^0$, diremos que eles são equivalentes se produzem a mesma árvore plana. Sendo assim, quando escrevermos $\tau \in t$, onde $t \in \mathcal{T}_n^0$, significará que τ é o elemento do conjunto de todas as árvores rotuladas em T_n^0 que produzem a mesma árvore plana enraizada em \mathcal{T}_n^0 .

Outra maneira de definir uma relação de equivalência em T_n^0 é por meio de uma permutação nos níveis $\{1, 2, \dots, n\}$. A saber, dizemos que τ e τ' são equivalentes se existir uma permutação σ em $\{1, 2, \dots, n\}$ preservando a ordem dos filhos em cada vértice de τ de modo que $\tau' = \sigma(\tau)$, onde $\sigma(\tau)$ é o grafo com conjunto de vértices $V = \{0, \sigma(1), \sigma(2), \dots, \sigma(n)\}$ e elos $E = \{\{\sigma(i), \sigma(j)\} : \{i, j\} \in E_\tau\}$. É claro que o conjunto de todas as classes de equivalências é precisamente o conjunto de todas as árvores planas enraizadas com n vértices distintos da raiz. Observe que podemos ter várias árvores rotuladas em T_n^0 gerando a mesma árvore plana enraizada. Note também que podemos calcular a cardinalidade da pré-imagem do mapeamento $m : \tau \mapsto m(\tau)$, bastando contar o número de permutações σ do conjunto $\{0, 1, 2, \dots, n\}$ que deixam a raiz inalterada e que respeitam a ordem dos filhos de qualquer vértice. Portanto, sendo $\tau \in T_n^0$ e $t = [\tau]$ a sua árvore plana associada, caracterizada por $\{s_v\}_{v \leq v_0}$, temos que

$$|[\tau]| = \frac{n!}{\prod_{v \geq 0} s_v!},$$

onde $n!$ conta todas as permutações do conjunto $\{1, 2, \dots, n\}$ e para cada vértice v , $s_v!$ é o número de permutações de seus filhos. Assim, a expressão acima é justamente o número de permutações dos vértices de τ , diferentes da raiz, que não alteram a ordem dos filhos em qualquer vértice.

Dado um vértice $v \neq 0$ (diferente da raiz), em uma árvore rotulada, a profundidade de v , que denotamos por $d(v)$, é o número de elos do caminho da raiz até esse vértice. Podemos atribuir níveis de forma natural para os vértices de uma árvore plana enraizada $t \in \mathcal{T}_n^0$ de tal modo que os filhos da raiz sejam rotulados pelos níveis $1, 2, \dots, s_0$ de cima para baixo. Em seguida ao vértice mais alto, ou seja 1 , tendo filhos com níveis $s_0 + 1, s_0 + 2, \dots, s_0 + s_1$, o vértice i tendo filhos com níveis $s_0 + s_1 + \dots + s_{i-1} + 1, \dots, s_0 + s_1 + \dots + s_{i-1} + s_i$, e assim por diante. A Figura 3.3 abaixo ilustra esse processo.

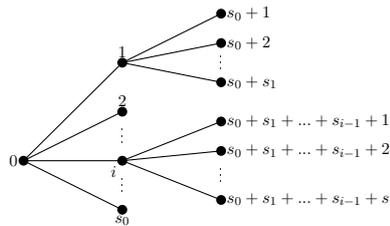


Figura 3.3: Ordenamento em árvores planas enraizadas.

Estaremos supondo sempre que os vértices de uma árvore plana enraizada $t \in \mathcal{T}^0$ são nivelados desta maneira. Assim, com este nivelamento, o conjunto de vértices V_τ em uma árvore enraizada

$\tau \in T_n^0$ admite uma ordem total: dado dois vértices u e v de τ , temos que $v < u$ se o nível natural de v é menor que o nível natural de u . Em outras palavras, $v < u$ se ou $d(v) < d(u)$ ou $d(v) = d(u)$, mas v está acima de u no plano de árvore enraizada associada a τ dado por t .

Se $\{u, v\}$ é um elo de τ , como a ordem é total, dois vértices são sempre comparáveis, ou seja, $u < v$ ou $v < u$. Portanto, qualquer elo $\{u, v\}$ em uma árvore enraizada é, na verdade, um par ordenado e podemos escrever (u, v) , se $u < v$.

Seja (u, v) um elo direcionado em uma árvore enraizada τ , então u é chamado pai (ou predecessor) e v é chamado filho (ou sucessor). Note que todo vértice em τ diferente da raiz tem um, e apenas um, pai. Vértices com mesmo pai são chamados de irmãos.

A raiz não tem pai e é um extremo com respeito a relação de ordem. A fim de estabelecer notação, seja $v \neq 0$ um vértice diferente da raiz, v' será o pai de v e s_v será o número de filhos de v , denotados por v^1, \dots, v^{s_v} . Se $s_v = 0$, diremos que v é ponto final ou uma folha de τ .

Note que também podemos ordenar os vértices de uma árvore rotulada enraizada $\tau \in T_n^0$ de maneira natural de modo que os filhos de qualquer vértice sejam ordenados seguindo a ordem de seus níveis. Por exemplo, o ordenamento para v^1, \dots, v^{s_v} seria $v^1 < \dots < v^{s_v}$ de cima para baixo começando de v^1 . De agora em diante estaremos supondo $\tau \in T_n^0$ como árvore ordenada segundo a ordem de seus níveis como discutido acima, isto é, os filhos de qualquer vértice (interno) estão ordenados.

Fixemos $(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^{n+1}$ tal que $G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)$, um grafo com vértices em $\{0, 1, \dots, n\}$ e elos $E(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n) = \{\{i, j\} : \gamma_i \approx \gamma_j\}$, seja conexo. A seguir, daremos a definição de uma classe de árvores importante que usaremos no decorrer do texto, esta classe é conhecida como conjunto de árvores de Penrose.

Seja $T_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)} = \{\tau \in T_n^0 : \tau \subset G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)\}$. Para o vértice $i \in V_\tau$, $d(i)$ é a profundidade do vértice i , isto é, o número de elos de i à raiz e i' é o pai de i .

Definição 3.7. O conjunto de árvores de Penrose de $G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)$, que denotaremos por $\mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}$, é formado pelas árvores $\tau \in T_n^0$, tais que

- (0) Se $\{i, j\} \in E_\tau$, então $\{i, j\} \in E(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)$, ou seja, $\gamma_i \approx \gamma_j$;
- (1) Se dois vértices i e j são irmãos, então $\{i, j\} \notin E(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)$, em outras palavras, $\gamma_i \sim \gamma_j$;
- (2) Se dois vértices i e j são tais que $d(i) = d(j)$, então $\{i, j\} \notin E(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)$, isto é, $\gamma_i \sim \gamma_j$;
- (3) Se dois vértices i e j são tais que $d(j) = d(i) - 1$ e $j > i'$, então $\{i, j\} \notin E(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)$, isto é, $\gamma_i \sim \gamma_j$.

Observe que na definição acima, temos que numa árvore de Penrose, pais e filhos são sempre incompatíveis e elementos de uma mesma geração são sempre compatíveis, bem como sobrinhos com tios mais velhos em decorrência da condição (3) da Definição 3.7. Note ainda que a definição depende apenas do plano de árvore enraizada associado a τ .

Exemplo 3.3. Se os polímeros $\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n$ são escolhidos de modo que o grafo $G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)$ seja completo, temos que todos os polímeros são incompatíveis e assim o conjunto $T_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}$ coincide com T_n^0 , enquanto o conjunto de Penrose $\mathcal{P}_{G(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n)}$ é formado por todas as árvores lineares.

Enunciaremos agora um resultado que nos permitirá reescrever a série (3.17) em termos de árvores enraizadas em T_n^0 .

Proposição 3.1. (*O. Penrose 67*) Considere ϕ^T como definida em (3.16), temos que

$$\phi^T(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n) = (-1)^n \sum_{\tau \in T_n^0} \mathbb{1}_{\mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}}(\tau),$$

onde $\mathbb{1}_{\mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}}$ é a função característica do conjunto de Penrose, ou seja,

$$\mathbb{1}_{\mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}}(\tau) = \begin{cases} 1, & \text{se } \tau \in \mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)} \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases}.$$

Antes de provar a proposição acima, notemos que ela nos diz que o sinal do termo ϕ^T depende apenas do número de polímeros fixados e ainda, esta expressão leva em conta os possíveis cancelamentos que ocorre na soma de ϕ^T dada na Definição 3.16.

Demonstração: Seja $p : T_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)} \rightarrow G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)$ um mapeamento que a cada $\tau \in T_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}$ associa $p(\tau) \subset G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)$ formado adicionando a τ todos os elos $\{i, j\} \in E_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)} \setminus E_\tau$ tais que ou $d(i) = d(j)$ ou $d(j) = d(i) - 1$ e $j > i'$. Reciprocamente definimos também um outro mapeamento $q : G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n) \rightarrow T_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}$ que a cada $G \subset G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)$ associa uma única árvore $q(G) \in T_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}$.

Construímos $q(G)$ da seguinte maneira: primeiro deletamos todos os elos $\{i, j\}$ de τ tais que $d(i) = d(j)$. Depois disso, note que teremos um grafo G' onde $d_{G'}(i) = d_G(i)$, $\forall i = 1, \dots, n$. E ainda, cada elo $\{i, j\}$ em G' é tal que $|d_{G'}(i) - d_{G'}(j)| = 1$. Em seguida, para cada vértice $i \neq 0$, excluimos os elos tais que $d(j) = d(i) - 1$ exceto um deles, quando j é mínimo visto como um número natural. O grafo resultante será ainda um grafo conexo contido em $G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)$ que, por construção, não tem ciclos, ou seja, uma árvore $q(G)$.

Por outro lado, dado $\tau \in T_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}$ se $G \subseteq G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)$ é tal que $q(G) = \tau$, por definição do mapeamento p , temos que $\tau \subseteq G \subseteq p(\tau)$, i.e., $p(\tau)$ é o grafo maximal, com respeito à relação de ordem parcial “ \subseteq ”, entre todos os grafos $G \subseteq G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)$ tais que $q(G) = \tau$. Com isso temos que

$$\begin{aligned} \phi^T &= \sum_{\substack{G \subset G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n) \\ G \text{ conexo}}} (-1)^{|E_G|} = \sum_{\tau \in T_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}} (-1)^{|E_\tau|} \sum_{\substack{G \subset G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n) \\ q(G) = \tau}} (-1)^{|E_G| - |E_\tau|} \\ &= (-1)^n \sum_{\tau \in T_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}} \sum_{\substack{G \subset G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n) \\ q(G) = \tau}} (-1)^{|E_G| - |E_\tau|} \\ &= (-1)^n \sum_{\tau \in T_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}} \sum_{\substack{G \subset G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n) \\ \tau \subseteq G \subseteq p(\tau)}} (-1)^{|E_G| - |E_\tau|} \\ &= (-1)^n \sum_{\tau \in T_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}} \sum_{E \subset E_{p(\tau)} \setminus E_\tau} (-1)^{|E|} \\ &= (-1)^n \sum_{\tau \in T_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}} \sum_{E \subset E_{p(\tau)} \setminus E_\tau} \prod_{\{i, j\} \in E} \left(e^{-V(\gamma_i, \gamma_j)} - 1 \right) \\ &= (-1)^n \sum_{\tau \in T_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}} \prod_{\{i, j\} \in E \subset E_{p(\tau)} \setminus E_\tau} \left[\left(e^{-V(\gamma_i, \gamma_j)} - 1 \right) + 1 \right] \\ &= (-1)^n \sum_{\tau \in T_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}} [-1 + 1]^{|E_{p(\tau)}| - |E_\tau|}. \end{aligned}$$

Nas expressões acima E é um subconjunto de elos e na anti-penúltima igualdade usamos a expansão de Mayer. Como o termo que está no último somatório contribuirá apenas se $E_{p(\tau)} \setminus E_\tau = \emptyset$, ou seja, $E_{p(\tau)} = E_\tau \implies p(\tau) = \tau$, em outras palavras, apenas quando $\tau \in \mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}$ e temos provada a proposição. ■

Uma vez provado esta identidade, podemos reescrever a série $|\Pi|_{\gamma_0}$,

$$\begin{aligned} |\Pi|_{\gamma_0}(\rho) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n} \sum_{\tau \in T_n^0} \mathbb{1}_{\mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}}(\tau) \rho_{\gamma_1} \cdots \rho_{\gamma_n} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\tau \in T_n^0} \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n} \mathbb{1}_{\mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}}(\tau) \rho_{\gamma_1} \cdots \rho_{\gamma_n} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\tau \in T_n^0} \phi_{\gamma_0}(\tau, \rho), \end{aligned} \tag{3.18}$$

onde

$$\phi_{\gamma_0}(\tau, \rho) = \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n} \mathbb{1}_{\mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}}(\tau) \rho_{\gamma_1} \cdots \rho_{\gamma_n}.$$

Observe que, como $\mathbb{1}_{\mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}}(\tau)$ conta apenas árvores de Penrose, podemos realizar a soma em (3.18) sobre todas as árvores rotuladas em T_n^0 . Note também que, devido à condição (3) para árvores de Penrose na Definição 3.7, o termo ϕ_{γ_0} depende apenas dos níveis de τ . Uma vantagem explícita da utilização da proposição acima é que ela nos permite reorganizar a série formal $|\Pi|_{\gamma_0}$ em termos de uma soma sobre termos associados apenas a árvores rotuladas, em outras palavras, reduzimos a quantidade de termos que há quando consideramos a soma sobre grafos conexos.

Uma vez que temos a identidade de Penrose, podemos obter novas cotas para ϕ_{γ_0} escolhendo uma família de árvores $\overline{\mathcal{P}}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}$, tal que $\mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)} \subset \overline{\mathcal{P}}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)} \subset T_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}$.

Consideramos a seguir três escolhas possíveis de $\overline{\mathcal{P}}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}$ que estão relacionadas com os três critérios já conhecidos para convergência em expansão de polímeros do gás de polímero abstrato.

Definição 3.8. O conjunto de árvores de Penrose fraco de $G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)$, denotado por $\mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^*$, é formado por todas as árvores τ com vértices em $\{0, 1, \dots, n\}$ e conjunto de elos E_τ , tais que

(0) Se $\{i, j\} \in E_\tau$, então $\gamma_i \approx \gamma_j$ (ou seja, $\tau \subset G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)$).

(1)* Se i e j são irmãos, então $\gamma_i \sim \gamma_j$.

Note que esta definição não menciona nada a respeito dos tios mais velhos na árvore, de modo que $\mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)} \subseteq \mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^*$.

Definição 3.9. O conjunto de árvores de Dobrushin de $G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)$, denotado por $\mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^{Dob}$, é formado por todas as árvores τ com vértices em $\{0, 1, \dots, n\}$ e conjunto de elos E_τ tais que

(0) Se $\{i, j\} \in E_\tau$, então $\gamma_i \approx \gamma_j$ (ou seja, $\tau \subset G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)$).

(1)^D Se i e j são irmãos, então $\gamma_i \neq \gamma_j$.

Note que, uma vez que \mathcal{R}_V é reflexiva para o potencial em pares *hard core* V , temos $\gamma \approx \gamma$. Assim, se $\gamma_i \sim \gamma_j$, temos necessariamente que $\gamma_i \neq \gamma_j$ e $\mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^* \subseteq \mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^{Dob}$.

Definição 3.10. O conjunto de árvores de Kotecký-Preiss de $G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)$, denotado por $\mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^{KP}$, é formado por todas as árvores τ com vértices em $\{0, 1, \dots, n\}$ e conjunto de elos E_τ , tais que

(0) Se $\{i, j\} \in E_\tau$, então $\gamma_i \approx \gamma_j$ (ou seja $\tau \subset G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)$).

Por definição, temos as seguintes condições:

$$\mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)} \subseteq \mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^* \subseteq \mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^{Dob} \subseteq \mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^{KP} \subseteq T_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}.$$

Note que, da Definição 3.10, segue imediatamente que $\mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^{KP} = T_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}$, pois no conjunto $T_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}$ toda árvore satisfaz à condição (0) desta. Denotando por $|\mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}|$ a cardinalidade do conjunto de Penrose, pela Proposição 3.1, temos

$$\begin{aligned} |\phi^T(\gamma_0, \dots, \gamma_n)| = |\mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}| &\leq |\mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^*| = \sum_{\tau \in T_n^0} \mathbb{1}_{\mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^*}(\tau) \\ &\leq |\mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^{Dob}| = \sum_{\tau \in T_n^0} \mathbb{1}_{\mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^{Dob}}(\tau) \\ &\leq |\mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^{KP}| = \sum_{\tau \in T_n^0} \mathbb{1}_{T_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}}(\tau). \end{aligned}$$

Deste modo, podemos usar o conjunto de Penrose fraco, que nos dá a melhor cota entre os três apresentados e limitar superiormente a série $|\Pi|_{\gamma_0}$. Temos assim,

$$\begin{aligned} |\Pi|_{\gamma_0}(\rho) &\leq \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n} \sum_{\tau \in T_n^0} \mathbb{1}_{\mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^*}(\tau) \rho_{\gamma_1} \cdots \rho_{\gamma_n} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\tau \in T_n^0} \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n} \mathbb{1}_{\mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^*}(\tau) \rho_{\gamma_1} \cdots \rho_{\gamma_n} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\tau \in T_n^0} \phi_{\gamma_0}^*(\tau, \rho), \end{aligned} \tag{3.19}$$

onde

$$\phi_{\gamma_0}^*(\tau, \rho) \doteq \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n} \mathbb{1}_{\mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^*}(\tau) \rho_{\gamma_1} \cdots \rho_{\gamma_n}. \tag{3.20}$$

Fazendo,

$$\Pi_{\gamma_0}^*(\rho) \doteq \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\tau \in T_n^0} \phi_{\gamma_0}^*(\tau, \rho), \tag{3.21}$$

temos que $|\Pi|_{\gamma_0}(\rho) \leq \Pi_{\gamma_0}^*(\rho)$.

Algo semelhante pode ser feito se consideramos as outras classes de árvores definidas acima.

A saber, podemos limitar $|\Pi|_{\gamma_0}(\rho)$ superiormente por

$$\Pi_{\gamma_0}^{Dob}(\rho) \doteq \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\tau \in T_n^0} \phi_{\gamma_0}^{Dob}(\tau, \rho),$$

onde

$$\phi_{\gamma_0}^{Dob}(\tau, \rho) \doteq \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n} \mathbb{1}_{\mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^{Dob}}(\tau) \rho_{\gamma_1} \cdots \rho_{\gamma_n}.$$

E também limitar $|\Pi|_{\gamma_0}(\rho)$ superiormente por

$$\Pi_{\gamma_0}^{KP}(\rho) \doteq \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\tau \in T_n^0} \phi_{\gamma_0}^{KP}(\tau, \rho),$$

onde

$$\phi_{\gamma_0}^{KP}(\tau, \rho) \doteq \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n} \mathbb{1}_{\mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^{KP}}(\tau) \rho_{\gamma_1} \cdots \rho_{\gamma_n}.$$

Observação 3.6. Diferentemente de ϕ_{γ_0} , definida para o conjunto de Penrose, temos que os fatores $\phi_{\gamma_0}^{*,Dob,KP}$ não dependem dos rótulos das árvores, mas apenas da estrutura topológica. Isto nos diz que os termos de $\phi_{\gamma_0}^*(\tau, \rho)$ podem ainda ser agrupados em termos de árvores não rotuladas. Essa independência nos rótulos advém da definição de cada conjunto considerado, em contraste com a definição de $\mathcal{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}$. Por exemplo, como os níveis são “mudos”, podemos distribuir os polímeros atentando a condição do conjunto de Penrose fraco, e as duas árvores na Figura 3.4 geram o mesmo termo $\phi_{\gamma_0}^*(\tau, \rho)$.

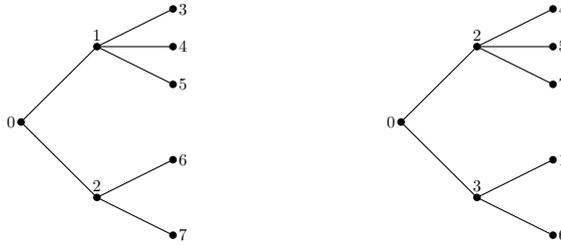


Figura 3.4

Com as considerações acima, podemos escrever as seguintes desigualdades

$$|\Pi|_{\gamma_0} \leq \Pi_{\gamma_0}^* \leq \Pi_{\gamma_0}^{Dob} \leq \Pi_{\gamma_0}^{KP}. \quad (3.22)$$

3.2.1 Reorganizando a série $\Pi_{\gamma_0}^*(\rho)$

Motivados pelo fato que $\phi_{\gamma_0}^*(\tau, \rho)$ não depende dos níveis associados aos vértices de τ mas apenas da sua estrutura topológica, podemos reorganizar (3.21) em termos de árvores enraizadas planas associadas a τ . Temos assim,

$$\phi_{\gamma_0}^*(\tau, \rho) = \phi_{\gamma_0}^*([\tau], \rho) = \phi_{\gamma_0}^*(t, \rho) = \prod_{v \geq 0} \left[\sum_{\substack{(\gamma_{v1}, \gamma_{v2}, \dots, \gamma_{vs_v}) \in \mathcal{P}^{s_v} \\ \gamma_{vi} \approx \gamma_v, \gamma_{vi} \sim \gamma_{vj}}} \rho_{\gamma_{v1}} \cdots \rho_{\gamma_{vs_v}} \right]. \quad (3.23)$$

Duas coisas precisam ser observadas na expressão acima. Convencionamos que para um vértice v tal que $s_v = 0$ o termo em colchetes seja igual a 1 e ao associar os polímeros $\gamma_{v^1}, \gamma_{v^2}, \dots, \gamma_{v^{s_v}}$ aos vértices filhos de v , temos uma dependência do polímero γ_v , o que faz com que a ordem no produto acima seja relevante. Portanto o produto é organizado de tal maneira que produtos associados aos ancestrais estão à esquerda dos correspondentes a descendentes. Por exemplo, na árvore da esquerda na Figura 3.4, temos

$$\phi_{\gamma_0}^*(t, \rho) = \left(\sum_{\substack{(\gamma_1, \gamma_2) \in \mathcal{P}^2 \\ \gamma_1 \sim \gamma_0, \gamma_2 \sim \gamma_0; \gamma_1 \sim \gamma_2}} \rho_{\gamma_1} \rho_{\gamma_2} \right) \left(\sum_{\substack{(\gamma_3, \gamma_4, \gamma_5) \in \mathcal{P}^3 \\ \gamma_3, \gamma_4, \gamma_5 \sim \gamma_1; \gamma_3 \sim \gamma_4 \sim \gamma_5}} \rho_{\gamma_3} \rho_{\gamma_4} \rho_{\gamma_5} \right) \left(\sum_{\substack{(\gamma_6, \gamma_7) \in \mathcal{P}^2 \\ \gamma_6, \gamma_7 \sim \gamma_2; \gamma_6 \sim \gamma_7}} \rho_{\gamma_6} \rho_{\gamma_7} \right).$$

Reorganizando a soma do lado direito de (3.21),

$$\begin{aligned} \Pi_{\gamma_0}^*(\rho) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\tau \in \mathcal{T}_n^0} \phi_{\gamma_0}^*(\tau, \rho) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{t \in \mathcal{T}_n^0} \sum_{\tau \in t} \phi_{\gamma_0}^*(t, \rho) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{t \in \mathcal{T}_n^0} \phi_{\gamma_0}^*(t, \rho) \sum_{\tau \in t} 1 \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{t \in \mathcal{T}_n^0} \phi_{\gamma_0}^*(t, \rho) \frac{n!}{\prod_{v \geq 0} s_v!} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{t \in \mathcal{T}_n^0} \phi_{\gamma_0}^*(t, \rho) \prod_{v \geq 0} \frac{1}{s_v!} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{t \in \mathcal{T}_n^0} \prod_{v \geq 0} \left[\frac{1}{s_v!} \sum_{\substack{(\gamma_{v^1}, \gamma_{v^2}, \dots, \gamma_{v^{s_v}}) \in \mathcal{P}^{s_v} \\ \gamma_{v^i} \sim \gamma_v, \gamma_{v^i} \sim \gamma_{v^j}}} \rho_{\gamma_{v^1}} \cdots \rho_{\gamma_{v^{s_v}}} \right] \\ &= \sum_{t \in \mathcal{T}^0} \prod_{v \geq 0} \left[\frac{1}{s_v!} \sum_{\substack{(\gamma_{v^1}, \gamma_{v^2}, \dots, \gamma_{v^{s_v}}) \in \mathcal{P}^{s_v} \\ \gamma_{v^i} \sim \gamma_v, \gamma_{v^i} \sim \gamma_{v^j}}} \rho_{\gamma_{v^1}} \cdots \rho_{\gamma_{v^{s_v}}} \right], \end{aligned}$$

onde usamos que $\sum_{\tau \in t} 1 = |[t]| = \frac{n!}{\prod_{v \geq 0} s_v!}$ e também $\mathcal{T}^0 = \cup_{n \geq 0} \mathcal{T}_n^0$. Portanto,

$$\Pi_{\gamma_0}^*(\rho) = \sum_{t \in \mathcal{T}^0} \prod_{v \geq 0} \left[\frac{1}{s_v!} \sum_{(\gamma_{v^1}, \gamma_{v^2}, \dots, \gamma_{v^{s_v}}) \in \mathcal{P}^{s_v}} \prod_{i=1}^{s_v} \mathbb{1}_{\{\gamma_{v^i} \sim \gamma_v\}} \prod_{1 \leq i < j \leq s_v} \mathbb{1}_{\{\gamma_{v^i} \sim \gamma_{v^j}\}} \rho_{\gamma_{v^1}} \cdots \rho_{\gamma_{v^{s_v}}} \right]. \quad (3.24)$$

De maneira inteiramente análoga,

$$\Pi_{\gamma_0}^{Dob}(\rho) = \sum_{t \in \mathcal{T}^0} \prod_{v \geq 0} \left[\frac{1}{s_v!} \sum_{(\gamma_{v^1}, \gamma_{v^2}, \dots, \gamma_{v^{s_v}}) \in \mathcal{P}^{s_v}} \prod_{i=1}^{s_v} \mathbb{1}_{\{\gamma_{v^i} \not\sim \gamma_v\}} \prod_{1 \leq i < j \leq s_v} \mathbb{1}_{\{\gamma_{v^i} \neq \gamma_{v^j}\}} \rho_{\gamma_{v^1}} \cdots \rho_{\gamma_{v^{s_v}}} \right] \quad (3.25)$$

e

$$\Pi_{\gamma_0}^{KP}(\rho) = \sum_{t \in \mathcal{T}^0} \prod_{v \geq 0} \left[\frac{1}{s_v!} \sum_{(\gamma_{v1}, \gamma_{v2}, \dots, \gamma_{vs_v}) \in \mathcal{P}^{s_v}} \prod_{i=1}^{s_v} \mathbb{1}_{\{\gamma_{vi} \approx \gamma_v\}} \rho_{\gamma_{v1}} \cdots \rho_{\gamma_{vs_v}} \right]. \quad (3.26)$$

3.2.2 Árvores e convergência

Agora começaremos a fazer algumas considerações com o intuito de provarmos critérios de convergência para a expansão em polímeros. Começamos definindo o que vem a ser um domínio próprio no espaço de funções $(0, \infty)^{\mathcal{P}} = \{\alpha : \mathcal{P} \rightarrow (0, \infty)\}$. Diremos que dado duas funções μ e ν em $(0, \infty)^{\mathcal{P}}$, $\mu < \nu \iff \mu_\gamma < \nu_\gamma, \forall \gamma \in \mathcal{P}$.

Para todo $n \in \mathbb{N}$ e toda $(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^{n+1}$, consideremos números $b_n(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)$ tais que $b_n(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n) \geq 0$. Dados os números b_n 's podemos definir uma função

$$\varphi^b : (0, \infty)^{\mathcal{P}} \rightarrow (0, \infty]^{\mathcal{P}}; u \mapsto \varphi^b(u),$$

com entradas,

$$[\varphi^b(u)](\gamma) \doteq \varphi_\gamma^b(u) = 1 + \sum_{n \geq 1} \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n} b_n(\gamma; \gamma_1, \dots, \gamma_n) u(\gamma_1) \dots u(\gamma_n). \quad (3.27)$$

Definimos o conjunto,

$$\mathcal{D}^b = \{u \in (0, \infty)^{\mathcal{P}} : \varphi_\gamma^b(u) < \infty, \forall \gamma \in \mathcal{P}\}.$$

Desta maneira $\varphi^b|_{\mathcal{D}^b}$ é uma função em $(0, \infty)^{\mathcal{P}}$. Em outras palavras, $\varphi^b(u) < \infty, \forall \gamma \in \mathcal{P}$, sempre que $u \in \mathcal{D}^b$.

Note que, se $u \in \mathcal{D}^b$ e $u' < u$, temos $\varphi_\gamma^b(u') < \varphi_\gamma^b(u) < \infty$, logo $u' \in \mathcal{D}^b$.

Seja $\mu : \mathcal{P} \rightarrow (0, \infty)$ uma função em \mathcal{D}^b e seja $r = \frac{\mu}{\varphi^b(\mu)}$.

Como γ varia em \mathcal{P} , temos que as entradas de r são da seguinte forma,

$$r(\gamma) = \frac{\mu(\gamma)}{\varphi_\gamma^b(\mu)}. \quad (3.28)$$

Por construção, podemos observar que, como $\mu < \varphi^b(\mu)$, temos $r < \mu$. Juntando o fato que $\mu(\gamma) > 0, \forall \gamma \in \mathcal{P}$, pois $\mu : \mathcal{P} \rightarrow (0, \infty)$, com o fato que $u \in \mathcal{D}^b$, ou seja, $\varphi_\gamma^b(\mu) < \infty, \forall \gamma \in \mathcal{P}$, segue que $r(\gamma) > 0, \forall \gamma \in \mathcal{P}$ e assim $r \in (0, \infty)^{\mathcal{P}}$. Em particular, $r \in \mathcal{D}^b$.

Agora, para qualquer $\rho \in \mathcal{D}^b$, consideremos o mapeamento $T^\rho : (0, \infty)^{\mathcal{P}} \rightarrow (0, \infty]^{\mathcal{P}}; u \mapsto T^\rho(u)$, que associa cada u à sequência $T^\rho(u) = \rho \varphi^b(u)$, cuja a γ -ésima é da forma

$$[T^\rho(u)](\gamma) \doteq T_\gamma^\rho(u) = \rho(\gamma) \varphi_\gamma^b(u),$$

com $\gamma \in \mathcal{P}$. Comparando essa última relação com a equação (3.28), concluímos que μ é um ponto fixo do mapeamento T^r , ou seja,

$$\mu = T^r(\mu). \quad (3.29)$$

Desta forma, para todo $\gamma_0 \in \mathcal{P}$,

$$\begin{aligned}
\mu_{\gamma_0} = T_{\gamma_0}^r(\mu) &= r_{\gamma_0} \varphi_{\gamma_0}^b(\mu) \\
&= r_{\gamma_0} + r_{\gamma_0} \sum_{\gamma_1 \in \mathcal{P}} b_1(\gamma_0; \gamma_1) \mu_{\gamma_1} + r_{\gamma_0} \sum_{(\gamma_1, \gamma_2) \in \mathcal{P}^2} b_2(\gamma_0; \gamma_1, \gamma_2) \mu_{\gamma_1} \mu_{\gamma_2} + \dots \\
&\quad + r_{\gamma_0} \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n} b_n(\gamma_0; \gamma_1, \dots, \gamma_n) \mu_{\gamma_1} \dots \mu_{\gamma_n} + \dots
\end{aligned} \tag{3.30}$$

Podemos representar a expressão acima na forma de diagramas. Digamos que $\circ_{\gamma_0} \doteq r_{\gamma_0}$, $\bullet_{\gamma_i} \doteq \mu_{\gamma_i}$ e para qualquer $n \geq 1$

$$\begin{array}{c} \bullet_{\gamma_1} \\ \bullet_{\gamma_2} \\ \vdots \\ \bullet_{\gamma_n} \end{array} \begin{array}{c} \diagup \\ \diagdown \\ \vdots \\ \diagup \\ \diagdown \end{array} \circ_{\gamma_0} = r_{\gamma_0} \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n} b_n(\gamma_0; \gamma_1, \dots, \gamma_n) \mu_{\gamma_1} \dots \mu_{\gamma_n}.$$

Assim (3.30), na forma de diagramas, é representada por:

$$\bullet_{\gamma_0} \doteq \mu_{\gamma_0} = T_{\gamma_0}^r(\mu) \doteq \circ_{\gamma_0} + \circ_{\gamma_0} - \bullet_{\gamma_1} + \begin{array}{c} \bullet_{\gamma_1} \\ \diagup \\ \circ_{\gamma_0} \\ \diagdown \\ \bullet_{\gamma_2} \end{array} + \dots + \begin{array}{c} \bullet_{\gamma_1} \\ \diagup \\ \circ_{\gamma_0} \\ \diagdown \\ \bullet_{\gamma_2} \\ \vdots \\ \bullet_{\gamma_n} \end{array} + \dots$$

Note que $\mu = T^r(\mu) = T^r(T^r(\mu)) = [T^r]^2(\mu)$, então

$$\begin{aligned}
\mu(\gamma_0) &= T_{\gamma_0}^r(T^r(\mu)) = r(\gamma_0) \varphi_{\gamma_0}^b(T^r(\mu)) \\
&= r(\gamma_0) \left(1 + \sum_{n \geq 1} \sum_{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n} b_n(\gamma_0; \gamma_1, \dots, \gamma_n) T^r(\mu)(\gamma_1) \dots T^r(\mu)(\gamma_n) \right) \\
&= r_{\gamma_0} + r_{\gamma_0} \sum_{n \geq 1} \sum_{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n} b_n(\gamma_0; \gamma_1, \dots, \gamma_n) r_{\gamma_1} \varphi_{\gamma_1}^b(\mu) \dots r_{\gamma_n} \varphi_{\gamma_n}^b(\mu) \\
&= r_{\gamma_0} + r_{\gamma_0} \sum_{\gamma_1 \in \mathcal{P}} b_1(\gamma_0; \gamma_1) r_{\gamma_1} \varphi_{\gamma_1}^b(\mu) + r_{\gamma_0} \sum_{(\gamma_1, \gamma_2) \in \mathcal{P}^2} b_2(\gamma_0; \gamma_1, \gamma_2) r_{\gamma_1} r_{\gamma_2} \varphi_{\gamma_1}^b(\mu) \varphi_{\gamma_2}^b(\mu) \\
&\quad + \dots + r_{\gamma_0} \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n} b_n(\gamma_0; \gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) r_{\gamma_1} r_{\gamma_2} \dots r_{\gamma_n} \varphi_{\gamma_1}^b(\mu) \varphi_{\gamma_2}^b(\mu) \dots \varphi_{\gamma_n}^b(\mu) + \dots
\end{aligned}$$

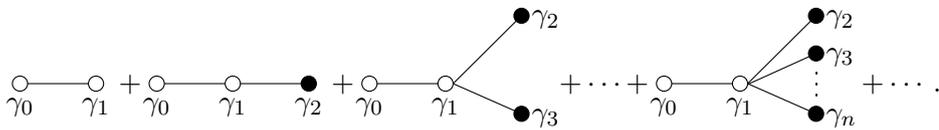
Vamos analisar

$$\begin{aligned}
r_{\gamma_0} \sum_{\gamma_1 \in \mathcal{P}} b_1(\gamma_0; \gamma_1) r_{\gamma_1} \varphi_{\gamma_1}^b(\mu) &= r_{\gamma_0} \sum_{\gamma_1 \in \mathcal{P}} b_1(\gamma_0; \gamma_1) r_{\gamma_1} \left(1 + \sum_{l \geq 1} \sum_{(\zeta_1, \dots, \zeta_l) \in \mathcal{P}^l} b_l(\gamma_1; \zeta_1, \dots, \zeta_l) \mu_{\zeta_1} \dots \mu_{\zeta_l} \right) \\
&= r_{\gamma_0} \sum_{\gamma_1 \in \mathcal{P}} b_1(\gamma_0; \gamma_1) r_{\gamma_1} + r_{\gamma_0} \sum_{\gamma_1 \in \mathcal{P}} b_1(\gamma_0; \gamma_1) r_{\gamma_1} \sum_{\zeta_1 \in \mathcal{P}} b_1(\gamma_1; \zeta_1) \mu_{\zeta_1} \\
&\quad + r_{\gamma_0} \sum_{\gamma_1 \in \mathcal{P}} b_1(\gamma_0; \gamma_1) r_{\gamma_1} \sum_{(\zeta_1, \zeta_2) \in \mathcal{P}^2} b_2(\gamma_1; \zeta_1, \zeta_2) \mu_{\zeta_1} \mu_{\zeta_2} \\
&\quad + r_{\gamma_0} \sum_{\gamma_1 \in \mathcal{P}} b_1(\gamma_0; \gamma_1) r_{\gamma_1} \sum_{(\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3) \in \mathcal{P}^3} b_3(\gamma_1; \zeta_1, \zeta_2, \zeta_3) \mu_{\zeta_1} \mu_{\zeta_2} \mu_{\zeta_3} \\
&\quad \vdots \\
&\quad + r_{\gamma_0} \sum_{\gamma_1 \in \mathcal{P}} b_1(\gamma_0; \gamma_1) r_{\gamma_1} \sum_{(\zeta_1, \dots, \zeta_l) \in \mathcal{P}^l} b_l(\gamma_1; \zeta_1, \dots, \zeta_l) \mu_{\zeta_1} \dots \mu_{\zeta_l} \\
&\quad \vdots
\end{aligned}$$

Substituindo a variável ζ_i por γ_i , para $i > 1$, temos

$$\begin{aligned}
r_{\gamma_0} \sum_{\gamma_1 \in \mathcal{P}} b_1(\gamma_0; \gamma_1) r_{\gamma_1} \varphi_{\gamma_1}^b(\mu) &= r_{\gamma_0} \sum_{\gamma_1 \in \mathcal{P}} b_1(\gamma_0; \gamma_1) r_{\gamma_1} + r_{\gamma_0} \sum_{(\gamma_1, \gamma_2) \in \mathcal{P}^2} b_1(\gamma_0; \gamma_1) r_{\gamma_1} b_1(\gamma_1; \gamma_2) \mu_{\gamma_2} \\
&\quad + r_{\gamma_0} \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3) \in \mathcal{P}^3} b_1(\gamma_0; \gamma_1) r_{\gamma_1} b_2(\gamma_1; \gamma_2, \gamma_3) \mu_{\gamma_2} \mu_{\gamma_3} \\
&\quad + r_{\gamma_0} \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4) \in \mathcal{P}^4} b_1(\gamma_0; \gamma_1) r_{\gamma_1} b_3(\gamma_1; \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4) \mu_{\gamma_2} \mu_{\gamma_3} \mu_{\gamma_4} \\
&\quad \vdots \\
&\quad + r_{\gamma_0} \sum_{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n} b_1(\gamma_0; \gamma_1) r_{\gamma_1} b_n(\gamma_1; \gamma_2, \dots, \gamma_n) \mu_{\gamma_2} \dots \mu_{\gamma_n} \\
&\quad \vdots
\end{aligned}$$

Na forma de diagramas, o lado direito da expressão acima é representado por:



A iteração do mapeamento T^r é tal que $[T^r]^2(\mu) = T^r(T^r(\mu))$ corresponde a substituir, em cada termo, uma bola cheia por uma bola aberta e a essa bola aberta associar todos os diagramas da expansão de T^r . Note que a iteração leva uma árvore enraizada plana até a segunda geração com bolas abertas na primeira geração e fechadas na segunda. Da mesma forma, a k -ésima iteração envolve todas as possíveis árvores planas enraizadas com até k gerações. Em cada árvore da expansão, os vértices da última geração são ocupados por bolas fechadas e todos os demais por bolas abertas.

Seja $\mathcal{T}^{0,k}$ o conjunto de árvores planas com geração máxima k . Podemos representar a k -ésima

iteração do mapeamento T^r de forma compacta pela seguinte expressão:

$$[T^r]_{\gamma_0}^k(\mu) = r_{\gamma_0} \left[\sum_{l=0}^{k-1} \Phi_{\gamma_0}^{(l)}(r) + R_{\gamma_0}^{(k)}(r, \mu) \right], \quad (3.31)$$

onde

$$\Phi_{\gamma_0}^{(l)}(r) = \sum_{t \in \mathcal{T}^{0,l}} \prod_{v \geq 0} \left[\sum_{(\gamma_{v1}, \gamma_{v2}, \dots, \gamma_{vs_v}) \in \mathcal{P}^{s_v}} b_{s_v}(\gamma_v; \gamma_{v1}, \dots, \gamma_{vs_v}) r_{\gamma_{v1}} \dots r_{\gamma_{vs_v}} \right]$$

e

$$R_{\gamma_0}^{(k)}(r, \mu) = \sum_{t \in \mathcal{T}^{0,k}} \prod_{v \geq 0} \left[\sum_{(\gamma_{v1}, \gamma_{v2}, \dots, \gamma_{vs_v}) \in \mathcal{P}^{s_v}} b_{s_v}(\gamma_v; \gamma_{v1}, \dots, \gamma_{vs_v}) \chi_{\gamma_{v1}}^{t,v^1} \dots \chi_{\gamma_{vs_v}}^{t,v^{s_v}} \right],$$

com

$$\chi_{\gamma_{vs_v}}^{t,v} = \begin{cases} r_{\gamma}, & \text{se } d_t(v) < k \\ \mu_{\gamma}, & \text{se } d_t(v) = k \end{cases}.$$

Na equação acima $d_t(v)$ é a profundidade do vértice v na árvore plana enraizada t . As expressões $R_{\gamma_0}^{(k)}(r, \mu)$ e $\Phi_{\gamma_0}^{(l)}(r)$ são semelhantes, diferindo apenas que $R_{\gamma_0}^{(k)}(r, \mu)$ envolve μ como atividade dos polímeros da k -ésima geração. Se v é tal que $s_v = 0$, convencionamos $b_0(\gamma_0) = 1$.

Pela equação (3.29), temos que $[T^r]_{\gamma_0}^k(\mu) = \mu_{\gamma_0}$ e pela equação (3.31), concluímos que

$$r_{\gamma_0} \sum_{l=0}^{k-1} \Phi_{\gamma_0}^{(l)}(r) \leq \mu_{\gamma_0}, \forall k \in \mathbb{N}. \quad (3.32)$$

A partir desta equação podemos enunciar o seguinte resultado,

Proposição 3.2. *Seja μ uma função em $(0, \infty)^{\mathcal{P}}$ e, para cada $\gamma \in \mathcal{P}$, seja $\varphi_{\gamma}^b(\mu)$ definida como em (3.27), satisfazendo $\varphi_{\gamma}^b(\mu) < +\infty$. Seja $r \in (0, \infty)^{\mathcal{P}}$ definida por (3.28). Então, para todo $\rho \leq r$, vale que*

(i) *A série*

$$\Phi_{\gamma_0}^b(\rho) = \sum_{t \in \mathcal{T}^0} \prod_{v \geq 0} \left[\sum_{(\gamma_{v1}, \gamma_{v2}, \dots, \gamma_{vs_v}) \in \mathcal{P}^{s_v}} b_{s_v}(\gamma_v; \gamma_{v1}, \dots, \gamma_{vs_v}) \rho_{\gamma_{v1}} \dots \rho_{\gamma_{vs_v}} \right], \quad (3.33)$$

converge para cada $\gamma_0 \in \mathcal{P}$ e admite, $\forall \gamma_0 \in \mathcal{P}$, a cota

$$\Phi_{\gamma_0}^b(\rho) \leq \Phi_{\gamma_0}^b(r) \leq \varphi_{\gamma_0}^b(\mu);$$

(ii)

$$\rho_{\gamma_0} \Phi_{\gamma_0}^b(\rho) = \lim_{n \rightarrow \infty} [T^{\rho}]_{\gamma_0}^n(\mu) \quad (3.34)$$

e $\rho_{\gamma_0} \Phi_{\gamma_0}^b(\rho)$ é solução da equação (3.29), ou seja,

$$T_{\gamma_0}^{\rho}(\rho_{\gamma_0} \Phi_{\gamma_0}^b(\rho)) = \rho_{\gamma_0} \Phi_{\gamma_0}^b(\rho) \quad (3.35)$$

Demonstração: De (3.32) temos que

$$r_{\gamma_0} \sum_{l=0}^n \Phi_{\gamma_0}^{(l)}(r) \leq \mu_{\gamma_0}, \forall n \in \mathbb{N}.$$

Como $r_\gamma \in (0, \infty)$, $\forall \gamma \in \mathcal{P}$, temos

$$\sum_{l=0}^n \Phi_{\gamma_0}^{(l)}(r) \leq \frac{\mu_{\gamma_0}}{r_{\gamma_0}} \doteq \varphi_{\gamma_0}^b(\mu), \forall n \in \mathbb{N}.$$

Fazendo $n \rightarrow \infty$ na expressão acima, o lado direito permanece inalterado enquanto que o lado esquerdo fica

$$\begin{aligned} \sum_{l=0}^{\infty} \Phi_{\gamma_0}^{(l)}(r) &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{t \in \mathcal{T}^{0,l}} \prod_{v \geq 0} \left[\sum_{(\gamma_{v1}, \gamma_{v2}, \dots, \gamma_{vs_v}) \in \mathcal{P}^{s_v}} b_{s_v}(\gamma_v; \gamma_{v1}, \dots, \gamma_{vs_v}) r_{\gamma_{v1}} \dots r_{\gamma_{vs_v}} \right] \\ &= \sum_{t \in \mathcal{T}^0} \prod_{v \geq 0} \left[\sum_{(\gamma_{v1}, \gamma_{v2}, \dots, \gamma_{vs_v}) \in \mathcal{P}^{s_v}} b_{s_v}(\gamma_v; \gamma_{v1}, \dots, \gamma_{vs_v}) r_{\gamma_{v1}} \dots r_{\gamma_{vs_v}} \right] \\ &\doteq \Phi_{\gamma_0}^b(r). \end{aligned}$$

Logo,

$$\Phi_{\gamma_0}^b(r) \leq \varphi_{\gamma_0}^b(\mu).$$

Por monotonicidade, para todo $\rho \leq r$, vale que $\rho_\gamma \leq r_\gamma$, $\forall \gamma \in \mathcal{P}$ e, desta forma,

$$\Phi_{\gamma_0}^b(\rho) \leq \Phi_{\gamma_0}^b(r) \leq \varphi_{\gamma_0}^b(\mu),$$

o que conclui o item (i) da proposição.

Agora, para o item (ii), utilizamos novamente a equação (3.31). Note que

$$[T^\rho]_{\gamma_0}^n(\rho) = \rho_{\gamma_0} \left[\sum_{l=0}^{n-1} \Phi_{\gamma_0}^{(l)}(\rho) + R_{\gamma_0}^{(n)}(\rho, \mu)|_{\mu=\rho} \right].$$

Mas,

$$R_{\gamma_0}^{(n)}(\rho, \mu)|_{\mu=\rho} = \sum_{t \in \mathcal{T}^{0,n}} \prod_{v \geq 0} \left[\sum_{(\gamma_{v1}, \gamma_{v2}, \dots, \gamma_{vs_v}) \in \mathcal{P}^{s_v}} b_{s_v}(\gamma_v; \gamma_{v1}, \dots, \gamma_{vs_v}) \rho_{\gamma_{v1}} \dots \rho_{\gamma_{vs_v}} \right] \doteq \Phi_{\gamma_0}^{(n)}(\rho).$$

E assim, temos

$$[T^\rho]_{\gamma_0}^n(\rho) = \rho_{\gamma_0} \sum_{l=0}^n \Phi_{\gamma_0}^{(l)}(\rho).$$

Portanto, para qualquer $\rho \leq r$,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} [T^\rho]_{\gamma_0}^n(\rho) = \rho_{\gamma_0} \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{l=0}^n \Phi_{\gamma_0}^{(l)}(\rho) = \rho_{\gamma_0} \sum_{l=0}^{\infty} \Phi_{\gamma_0}^{(l)}(\rho) = \rho_{\gamma_0} \Phi_{\gamma_0}^b(\rho).$$

E por fim,

$$\begin{aligned}
\rho_{\gamma_0} \Phi_{\gamma_0}^b(\rho) &= \lim_{n \rightarrow \infty} [T^\rho]_{\gamma_0}^{n+1}(\rho) \\
&= \lim_{n \rightarrow \infty} [T^\rho]_{\gamma_0}([T^\rho]_{\gamma_0}^n(\rho)) \\
&= \lim_{n \rightarrow \infty} \rho_{\gamma_0} \varphi_{\gamma_0}^b([T^\rho]_{\gamma_0}^n(\rho)) \\
&= \rho_{\gamma_0} \varphi_{\gamma_0}^b\left(\lim_{n \rightarrow \infty} [T^\rho]_{\gamma_0}^n(\rho)\right) \\
&= \rho_{\gamma_0} \varphi_{\gamma_0}^b(\rho_{\gamma_0} \Phi_{\gamma_0}^b(\rho)) \\
&= T_{\gamma_0}^\rho(\rho_{\gamma_0} \Phi_{\gamma_0}^b(\rho)).
\end{aligned}$$

■

A seguir, discutiremos critérios que nos permitem garantir convergência para expansão em polímeros.

3.2.3 Critérios de Convergência

Iniciaremos discutindo o critério de Fernández-Procacci e, em seguida, falaremos de outros dois critérios devido a Dobrushin e a Kotecký-Preiss. Todos esses critérios baseiam-se em escolhas “inteligentes” para os números b_n 's que definimos na seção anterior e na Proposição 3.2.

Critério de Fernández-Procacci.

Fazendo a escolha

$$b_n(\gamma_0; \gamma_1, \dots, \gamma_n) = b_n^*(\gamma_0; \gamma_1, \dots, \gamma_n) \doteq \frac{1}{n!} \prod_{i=1}^n \mathbb{1}_{\{\gamma_i \not\sim \gamma_0\}} \prod_{1 \leq i < j \leq n} \mathbb{1}_{\{\gamma_i \sim \gamma_j\}},$$

teremos

$$\varphi_{\gamma_0}^{b^*}(\mu) = 1 + \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n \\ \gamma_i \not\sim \gamma_0, \gamma_i \sim \gamma_j}} \mu_{\gamma_1} \cdots \mu_{\gamma_n} = \Xi_{\mathcal{P}_{\gamma_0}}(\mu).$$

Pela Proposição 3.2, segue que a série

$$\Phi_{\gamma_0}^{b^*}(\rho) = \sum_{t \in \mathcal{T}^0} \prod_{v \geq 0} \left[\sum_{(\gamma_{v1}, \gamma_{v2}, \dots, \gamma_{vs_v}) \in \mathcal{P}^{s_v}} \frac{1}{s_v!} \prod_{i=1}^{s_v} \mathbb{1}_{\{\gamma_i \not\sim \gamma_v\}} \prod_{1 \leq i < j \leq s_v} \mathbb{1}_{\{\gamma_i \sim \gamma_j\}} \rho_{\gamma_{v1}} \cdots \rho_{\gamma_{vs_v}} \right], \quad (3.36)$$

é convergente para todo $\rho \leq r^*$, com

$$r_\gamma^* = \frac{\mu_\gamma}{\Xi_{\mathcal{P}_\gamma}(\mu)}.$$

Comparando (3.36) com (3.24), observamos imediatamente que

$$\Pi_{\gamma_0}^*(\rho) = \Phi_{\gamma_0}^{b^*}(\rho),$$

e temos o seguinte resultado para a convergência da expansão em polímeros.

Teorema 3.1 (Fernández-Procacci). Escolha $\mu \in \mathcal{D}^* \subset (0, \infty)^{\mathcal{P}}$ e seja $r^* \in (0, \infty)^{\mathcal{P}}$ tal que

$$r_{\gamma_0}^* = \frac{\mu_{\gamma_0}}{\Xi_{\mathcal{P}_{\gamma_0}}(\mu)}. \quad (3.37)$$

Seja ρ tal que, $\rho_{\gamma} \leq r_{\gamma}^*$, $\forall \gamma \in \mathcal{P}$. Então, a série $|\Pi|_{\gamma_0}(\rho)$ definida em (3.17) é finita para cada $\gamma_0 \in \mathcal{P}$ e vale

$$|\Pi|_{\gamma_0}(\rho) \leq \Xi_{\mathcal{P}_{\gamma_0}}(\mu).$$

Portanto, $\rho_{\gamma_0} |\Pi|_{\gamma_0}(\rho) \leq \mu_{\gamma_0}$, $\forall \gamma_0 \in \mathcal{P}$.

Demonstração: Como $\Pi_{\gamma_0}^*(\rho) = \Phi_{\gamma_0}^{b^*}(\rho)$, pela Proposição 3.2, segue que $\Pi_{\gamma_0}^*(\rho)$ é finita para cada $\gamma_0 \in \mathcal{P}$ e todo $\rho_{\gamma} \leq r_{\gamma}^*$, onde r_{γ}^* é dado por (3.37). Além disso,

$$\Pi_{\gamma_0}^*(\rho) \leq \Xi_{\mathcal{P}_{\gamma_0}}(\mu), \quad \forall \gamma_0 \in \mathcal{P}.$$

De (3.22),

$$|\Pi|_{\gamma_0}(\rho) \leq \Pi_{\gamma_0}^*(\rho),$$

o que nos leva a concluir os mesmos resultados para $|\Pi|_{\gamma_0}(\rho)$. ■

Critério de Dobrushin.

Escolhendo agora

$$b_n(\gamma_0; \gamma_1, \dots, \gamma_n) = b_n^{Dob}(\gamma_0; \gamma_1, \dots, \gamma_n) \doteq \frac{1}{n!} \prod_{i=1}^n \mathbb{1}_{\{\gamma_i \approx \gamma_0\}} \prod_{1 \leq i < j \leq n} \mathbb{1}_{\{\gamma_i \neq \gamma_j\}},$$

teremos

$$\varphi_{\gamma_0}^{b^{Dob}}(\mu) = 1 + \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n \\ \gamma_i \approx \gamma_0, \gamma_i \neq \gamma_j}} \mu_{\gamma_1} \cdots \mu_{\gamma_n} = \prod_{\gamma \approx \gamma_0} [1 + \mu_{\gamma}]. \quad (3.38)$$

Para verificar a última igualdade em (3.38), podemos proceder por indução na cardinalidade do conjunto de polímeros.

Seja $\Lambda \subset \mathcal{P}$, com $|\Lambda| = 2$. Sejam $\gamma_1, \gamma_2 \in \Lambda$ tais que $\gamma_1, \gamma_2 \approx \gamma_0$, temos que,

$$\begin{aligned} \varphi_{\gamma_0}^{b^{Dob}}(\mu) &= 1 + \sum_{\substack{\gamma_1 \in \Lambda \\ \gamma_1 \approx \gamma_0}} \mu_{\gamma_1} + \frac{1}{2!} \sum_{\substack{(\gamma_1, \gamma_2) \in \Lambda^2 \\ \gamma_i \approx \gamma_0, \gamma_i \neq \gamma_j}} \mu_{\gamma_1} \mu_{\gamma_2} \\ &= 1 + \mu_{\gamma_1} + \mu_{\gamma_2} + \frac{1}{2} [\mu_{\gamma_1} \mu_{\gamma_2} + \mu_{\gamma_2} \mu_{\gamma_1}] \\ &= 1 + \mu_{\gamma_1} + \mu_{\gamma_2} + \mu_{\gamma_1} \mu_{\gamma_2}. \end{aligned}$$

Por outro lado,

$$\prod_{\gamma \approx \gamma_0} [1 + \mu_{\gamma}] = [1 + \mu_{\gamma_1}] [1 + \mu_{\gamma_2}] = 1 + \mu_{\gamma_1} + \mu_{\gamma_2} + \mu_{\gamma_1} \mu_{\gamma_2}.$$

E neste caso segue $\varphi_{\gamma_0}^{b^{Dob}}(\mu) = \prod_{\gamma \approx \gamma_0} [1 + \mu_{\gamma}]$.

Denotemos por Λ_k um subconjunto Λ tal que $|\Lambda| = k$ e suponhamos que a igualdade 3.38

seja válida para este subconjunto. Devemos mostrar que vale também para Λ_{k+1} (um conjunto Λ com $|\Lambda| = k + 1$), ou seja, $k + 1$ polímeros com $\gamma_i \approx \gamma_0$ e $\gamma_i \neq \gamma_j$.

$$\begin{aligned}
\prod_{\gamma \approx \gamma_0} [1 + \mu_\gamma] &= \left[\prod_{\gamma \approx \gamma_0} [1 + \mu_\gamma] \right]_{\Lambda_k} [1 + \mu_{\gamma_{k+1}}] \\
&= \left[1 + \sum_{n=1}^k \frac{1}{n!} \sum_{\substack{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \Lambda_k^n \\ \gamma_i \approx \gamma_0, \gamma_i \neq \gamma_j}} \mu_{\gamma_1} \cdots \mu_{\gamma_n} \right] [1 + \mu_{\gamma_{k+1}}] \\
&= 1 + \mu_{\gamma_{k+1}} + \sum_{n=1}^k \frac{1}{n!} \sum_{\substack{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \Lambda_k^n \\ \gamma_i \approx \gamma_0, \gamma_i \neq \gamma_j}} \mu_{\gamma_1} \cdots \mu_{\gamma_n} + \mu_{\gamma_{k+1}} \left(\sum_{n=1}^k \frac{1}{n!} \sum_{\substack{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \Lambda_k^n \\ \gamma_i \approx \gamma_0, \gamma_i \neq \gamma_j}} \mu_{\gamma_1} \cdots \mu_{\gamma_n} \right) \\
&= 1 + \sum_{\substack{\gamma_1 \in \Lambda_{k+1} \\ \gamma_1 \approx \gamma_0}} \mu_{\gamma_1} + \sum_{n=2}^k \frac{1}{n!} \sum_{\substack{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \Lambda_k^n \\ \gamma_i \approx \gamma_0, \gamma_i \neq \gamma_j}} \mu_{\gamma_1} \cdots \mu_{\gamma_n} + \mu_{\gamma_{k+1}} \sum_{\substack{\gamma_1 \in \Lambda_k \\ \gamma_1 \approx \gamma_0}} \mu_{\gamma_1} \\
&\quad + \mu_{\gamma_{k+1}} \left(\sum_{n=2}^k \frac{1}{n!} \sum_{\substack{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \Lambda_k^n \\ \gamma_i \approx \gamma_0, \gamma_i \neq \gamma_j}} \mu_{\gamma_1} \cdots \mu_{\gamma_n} \right) \\
&= 1 + \sum_{\substack{\gamma_1 \in \Lambda_{k+1} \\ \gamma_1 \approx \gamma_0}} \mu_{\gamma_1} + \frac{1}{2!} \sum_{\substack{(\gamma_1, \gamma_2) \in \Lambda_k^2 \\ \gamma_i \approx \gamma_0, \gamma_i \neq \gamma_j}} \mu_{\gamma_1} \mu_{\gamma_2} + \sum_{n=3}^k \frac{1}{n!} \sum_{\substack{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \Lambda_k^n \\ \gamma_i \approx \gamma_0, \gamma_i \neq \gamma_j}} \mu_{\gamma_1} \cdots \mu_{\gamma_n} \\
&\quad + \mu_{\gamma_{k+1}} \sum_{\substack{\gamma_1 \in \Lambda_k \\ \gamma_1 \approx \gamma_0}} \mu_{\gamma_1} + \mu_{\gamma_{k+1}} \left(\sum_{n=2}^k \frac{1}{n!} \sum_{\substack{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \Lambda_k^n \\ \gamma_i \approx \gamma_0, \gamma_i \neq \gamma_j}} \mu_{\gamma_1} \cdots \mu_{\gamma_n} \right) \\
&= 1 + \sum_{\substack{\gamma_1 \in \Lambda_{k+1} \\ \gamma_1 \approx \gamma_0}} \mu_{\gamma_1} + \frac{1}{2!} \sum_{\substack{(\gamma_1, \gamma_2) \in \Lambda_k^2 \\ \gamma_i \approx \gamma_0, \gamma_i \neq \gamma_j}} \mu_{\gamma_1} \mu_{\gamma_2} + \sum_{n=3}^k \frac{1}{n!} \sum_{\substack{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \Lambda_k^n \\ \gamma_i \approx \gamma_0, \gamma_i \neq \gamma_j}} \mu_{\gamma_1} \cdots \mu_{\gamma_n} \\
&\quad + \frac{1}{2!} \sum_{\substack{(\gamma_1, \gamma_{k+1}) \in \Lambda_k^2 \\ \gamma_i \approx \gamma_0, \gamma_i \neq \gamma_j}} \mu_{\gamma_1} \mu_{\gamma_{k+1}} + \mu_{\gamma_{k+1}} \left(\sum_{n=2}^k \frac{1}{n!} \sum_{\substack{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \Lambda_k^n \\ \gamma_i \approx \gamma_0, \gamma_i \neq \gamma_j}} \mu_{\gamma_1} \cdots \mu_{\gamma_n} \right) \\
&= 1 + \sum_{\substack{\gamma_1 \in \Lambda_{k+1} \\ \gamma_1 \approx \gamma_0}} \mu_{\gamma_1} + \frac{1}{2!} \sum_{\substack{(\gamma_1, \gamma_2) \in \Lambda_{k+1}^2 \\ \gamma_i \approx \gamma_0, \gamma_i \neq \gamma_j}} \mu_{\gamma_1} \mu_{\gamma_2} + \sum_{n=3}^k \frac{1}{n!} \sum_{\substack{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \Lambda_k^n \\ \gamma_i \approx \gamma_0, \gamma_i \neq \gamma_j}} \mu_{\gamma_1} \cdots \mu_{\gamma_n} \\
&\quad + \mu_{\gamma_{k+1}} \left(\sum_{n=2}^k \frac{1}{n!} \sum_{\substack{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \Lambda_k^n \\ \gamma_i \approx \gamma_0, \gamma_i \neq \gamma_j}} \mu_{\gamma_1} \cdots \mu_{\gamma_n} \right).
\end{aligned}$$

Procedendo desta maneira, obtemos todos os termos do somatório referentes agora aos polímeros

em Λ_{k+1} , de modo que

$$\prod_{\gamma \sim \gamma_0} [1 + \mu_\gamma] = 1 + \sum_{n=1}^{k+1} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \Lambda_{k+1}^n \\ \gamma_i \sim \gamma_0, \gamma_i \neq \gamma_j}} \mu_{\gamma_1} \cdots \mu_{\gamma_n},$$

concluindo assim o passo de indução e temos que a equação (3.38) é válida para $|\Lambda| = k + 1$.

Usando novamente a Proposição 3.2, temos que

$$\Phi_{\gamma_0}^{b^{Dob}}(\rho) = \sum_{t \in \mathcal{T}^0} \prod_{v \geq 0} \left[\sum_{(\gamma_{v,1}, \gamma_{v,2}, \dots, \gamma_{v,s_v}) \in \mathcal{P}^{s_v}} \frac{1}{s_v!} \prod_{i=1}^{s_v} \mathbb{1}_{\{\gamma_i \sim \gamma_0\}} \prod_{1 \leq i < j \leq s_v} \mathbb{1}_{\{\gamma_i \neq \gamma_j\}} \rho_{\gamma_{v,1}} \cdots \rho_{\gamma_{v,s_v}} \right], \quad (3.39)$$

converge para todo $\rho \leq r^{Dob}$, onde

$$r_{\gamma_0}^{Dob} = \frac{\mu_{\gamma_0}}{\prod_{\gamma \sim \gamma_0} [1 + \mu_\gamma]}.$$

Comparando (3.39) com (3.25), temos

$$\Pi_{\gamma_0}^{Dob}(\rho) = \Phi_{\gamma_0}^{b^{Dob}}(\rho).$$

Logo, podemos enunciar o seguinte resultado:

Teorema 3.2 (Dobrushin). *Escolha $\mu \in \mathcal{D}^{Dob} \subset (0, \infty)^{\mathcal{P}}$ e seja $r^{Dob} \in (0, \infty)^{\mathcal{P}}$ tal que*

$$r_{\gamma}^{Dob} = \frac{\mu_{\gamma}}{\prod_{\tilde{\gamma} \sim \gamma} [1 + \mu_{\tilde{\gamma}}]}. \quad (3.40)$$

Seja $\rho \in [0, \infty)^{\mathcal{P}}$ tal que, $\rho_{\gamma} \leq r_{\gamma}^{Dob}$, $\forall \gamma \in \mathcal{P}$. Então, a série $|\Pi|_{\gamma_0}(\rho)$ definida em (3.17) é finita para cada $\gamma_0 \in \mathcal{P}$ e vale

$$|\Pi|_{\gamma_0}(\rho) \leq \prod_{\tilde{\gamma} \sim \gamma_0} [1 + \mu_{\tilde{\gamma}}].$$

Portanto, $\rho_{\gamma_0} |\Pi|_{\gamma_0}(\rho) \leq \mu_{\gamma_0}$, $\forall \gamma_0 \in \mathcal{P}$.

Demonstração: De maneira análoga ao que foi feito para o critério de Fernández-Procacci, basta aplicar a Proposição 3.2 em $\Pi_{\gamma_0}^{Dob}(\rho)$, usar que $\Pi_{\gamma_0}^{Dob}(\rho) = \Phi_{\gamma_0}^{b^{Dob}}(\rho)$ e de (3.22), segue o resultado, pois

$$|\Pi|_{\gamma_0}(\rho) \leq \Pi_{\gamma_0}^{Dob}.$$

■

Observação 3.7. Na literatura a condição de Dobrushin é geralmente encontrada como

$$\rho_{\gamma} \leq r_{\gamma}^{Dob} = (e^{\bar{\mu}_{\gamma}} - 1) e^{-\sum_{\tilde{\gamma} \in \mathcal{P}: \tilde{\gamma} \sim \gamma} \bar{\mu}_{\tilde{\gamma}}}.$$

Em particular, no próprio artigo de Dobrushin é encontrado assim, mas esta expressão é equivalente a usada no teorema acima, bastando apenas fazer

$$\bar{\mu}_{\gamma} = \log[1 + \mu_{\gamma}].$$

Critério de Kotecký-Preiss.

O terceiro critério que discutiremos é o de Kotecký-Preiss e para estabelecê-lo basta tomarmos

$$b_n(\gamma_0; \gamma_1, \dots, \gamma_n) = b_n^{KP}(\gamma_0; \gamma_1, \dots, \gamma_n) \doteq \frac{1}{n!} \prod_{i=1}^n \mathbb{1}_{\{\gamma_i \approx \gamma_0\}}.$$

Assim,

$$\varphi_{\gamma_0}^{b^{KP}}(\mu) = 1 + \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n \\ \gamma_i \approx \gamma_0, 1 \leq i \leq n}} \mu_{\gamma_1} \cdots \mu_{\gamma_n} = 1 + \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \left[\sum_{\substack{\gamma \in \mathcal{P} \\ \gamma \approx \gamma_0}} \mu_{\gamma} \right]^n = \exp \left[\sum_{\substack{\gamma \in \mathcal{P} \\ \gamma \approx \gamma_0}} \mu_{\gamma} \right]. \quad (3.41)$$

Então,

$$\Phi_{\gamma_0}^{b^{KP}}(\rho) = \sum_{t \in \mathcal{T}^0} \prod_{v \geq 0} \left[\sum_{(\gamma_{v1}, \gamma_{v2}, \dots, \gamma_{vs_v}) \in \mathcal{P}^{s_v}} \frac{1}{s_v!} \prod_{i=1}^{s_v} \mathbb{1}_{\{\gamma_i \approx \gamma_v\}} \rho_{\gamma_{vi}} \cdots \rho_{\gamma_{vs_v}} \right], \quad (3.42)$$

converge para todo $\rho \leq r^{KP}$, onde

$$r_{\gamma_0}^{KP} = \frac{\mu_{\gamma_0}}{\exp \left[\sum_{\substack{\gamma \in \mathcal{P} \\ \gamma \approx \gamma_0}} \mu_{\gamma} \right]}.$$

Comparando (3.42) com (3.26), temos

$$\Pi_{\gamma_0}^{KP}(\rho) = \Phi_{\gamma_0}^{b^{KP}}(\rho).$$

Logo, segue o seguinte critério:

Teorema 3.3 (Kotecký-Preiss). Escolha $\mu \in \mathcal{D}^{KP} \subset (0, \infty)^{\mathcal{P}}$ e seja $r^{KP} \in (0, \infty)^{\mathcal{P}}$ tal que

$$r_{\gamma_0}^{KP} = \frac{\mu_{\gamma_0}}{\exp \left[\sum_{\substack{\gamma \in \mathcal{P} \\ \gamma \approx \gamma_0}} \mu_{\gamma} \right]}. \quad (3.43)$$

Seja $\rho \in [0, \infty)^{\mathcal{P}}$ tal que, $\rho_{\gamma} \leq r_{\gamma}^{KP}$, $\forall \gamma \in \mathcal{P}$. Então, a série $|\Pi|_{\gamma_0}(\rho)$ definida em (3.17) é finita para cada $\gamma_0 \in \mathcal{P}$ e

$$|\Pi|_{\gamma_0}(\rho) \leq \exp \left[\sum_{\substack{\gamma \in \mathcal{P} \\ \gamma \approx \gamma_0}} \mu_{\gamma} \right].$$

Portanto, $\rho_{\gamma_0} |\Pi|_{\gamma_0}(\rho) \leq \mu_{\gamma_0}$, $\forall \gamma_0 \in \mathcal{P}$.

Demonstração: É similar a dada nos dois teoremas anteriores. ■

Resumindo os critérios que discutimos acima, as condições de convergência são da forma

$$\rho_{\gamma} \leq r_{\gamma} = \frac{\mu_{\gamma}}{\varphi_{\gamma}^b(\mu)},$$

com

$$\varphi_\gamma^b(\mu) = \begin{cases} \exp \left[\sum_{\substack{\gamma \in \mathcal{P} \\ \gamma \approx \gamma_0}} \mu_\gamma \right], & \text{(Kotecký-Preiss)} \\ \prod_{\gamma \approx \gamma_0} [1 + \mu_\gamma], & \text{(Dobrushin)} \\ \Xi_{\mathcal{P}_{\gamma_0}}(\mu), & \text{(Fernández-Procacci)} \end{cases},$$

onde cada condição é mais fraca, no sentido de ter mais hipóteses sobre os polímeros, que a precedente. A saber, fixado $\mu \in (0, \infty)^{\mathcal{P}}$,

$$\Xi_{\mathcal{P}_{\gamma_0}}(\mu) \leq \prod_{\gamma \approx \gamma_0} [1 + \mu_\gamma] \leq \exp \left[\sum_{\substack{\gamma \in \mathcal{P} \\ \gamma \approx \gamma_0}} \mu_\gamma \right],$$

o que implica que,

$$r_\gamma^{KP} \leq r_\gamma^{Dob} \leq r_\gamma^*.$$

Devemos notar que os critérios nos fornecem também um raio de convergência para a expansão em polímeros.

A seguir discutiremos alguns modelos como aplicação da técnica que acabamos de desenvolver até aqui e como os critérios de convergências se aplicam a esses modelos.

3.3 Aplicações da Expansão em Polímeros

3.3.1 Modelo Dominó em \mathbb{Z}^2

Começaremos com o modelo Dominó onde o conjunto de polímeros, \mathcal{P} , é formado por elos de vizinhos próximos na rede cúbica bidimensional. Para todo $\gamma \in \mathcal{P}$ tomamos $\rho_\gamma = \epsilon$, com $\epsilon > 0$ e diremos que, para $\gamma_i, \gamma_j \in \mathcal{P}$, $\gamma_i \approx \gamma_j \iff \gamma_i \cap \gamma_j \neq \emptyset$. Em outras palavras, a relação de incompatibilidade é a interseção não vazia.

Por simetria, é razoável assumir que a atividade dos polímeros é a mesma em toda rede e chamaremos esse valor de μ , para todo $\gamma \in \mathcal{P}$.

Note que, fixado um polímero γ (veja Figura 3.5), através da relação de incompatibilidade desse modelo, existem 6 elos de vizinhos próximos que intersectam γ , ou seja, que são incompatíveis com este. Como a relação é reflexiva, isto é, todo polímero é incompatível a ele mesmo, teremos que existem ao todo 7 polímeros que são incompatíveis com γ .

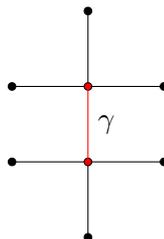


Figura 3.5

Assim, para Kotecký-Preiss, o critério de convergência no modelo dominó é

$$\rho_{\gamma_0} \leq r_{\gamma_0}^{KP} = \frac{\mu_{\gamma_0}}{\exp \left[\sum_{\gamma \sim \gamma_0} \mu_{\gamma} \right]} \iff \epsilon \leq \frac{\mu}{e^{7\mu}}.$$

O ponto de máximo na parte direita da desigualdade acima ocorre quando $\mu = \frac{1}{7}$ e assim, na melhor das hipóteses, poderíamos ter

$$\epsilon \leq \frac{1}{7e} \approx 0.0525.$$

E garantiríamos a convergência.

Enquanto isso, a condição de Dobrushin deve ser tal que

$$\rho_{\gamma_0} \leq \frac{\mu_{\gamma_0}}{\prod_{\gamma \sim \gamma_0} [1 + \mu_{\gamma}]} \iff \epsilon \leq \frac{\mu}{[1 + \mu]^7}.$$

E novamente, o valor máximo da parte direita na desigualdade ocorre em $\mu = \frac{1}{6}$, o que nos leva a concluir que na melhor das hipóteses poderíamos ter garantia de convergência, no critério de Dobrushin, desde que satisfeito

$$\epsilon \leq \frac{\frac{1}{6}}{[1 + \frac{1}{6}]^7} \approx 0.0566.$$

Na condição de Fernández-Procacci, temos

$$\rho_{\gamma_0} \leq \frac{\mu_{\gamma_0}}{\Xi_{\mathcal{P}_{\gamma_0}}(\mu)} \iff \epsilon \leq \frac{\mu}{1 + 7\mu + 9\mu^2}.$$

E depois de calcular o máximo, como nos outros casos,

$$\epsilon \leq \frac{1}{13} \approx 0.0769.$$

3.3.2 Gás na rede em um grafo de grau limitado

Consideraremos agora um gás distribuído em uma rede triangular no plano em um grafo de grau limitado e potencial em pares do tipo *hard core*.

Seja $G = (\mathbb{V}, \mathbb{E})$ um grafo infinito com conjunto de vértice \mathbb{V} e conjunto de elos \mathbb{E} , com G sendo de grau limitado e grau máximo Δ . Vamos especificar agora os polímeros e a relação de incompatibilidade.

Diremos que $\mathcal{P} = \mathbb{V}$, ou seja, os polímeros são os vértices de G . E diremos também que dois polímeros γ, γ' são incompatíveis se, e somente se, ou $\gamma = \gamma'$ ou $\{\gamma, \gamma'\} \in \mathbb{E}$.

A este sistema chamamos de gás na rede do tipo *hard core* auto-repulsivo em G .

Em geral, como os polímeros não possuem estrutura, são apenas os vértices de G , podemos supor que a atividade de cada polímero $x \in \mathcal{P}$ é constante, ou seja, $\rho_x = \rho, \forall x \in \mathcal{P}$. Além disso, como a relação de incompatibilidade leva em conta a incidência no vértice, é de se esperar que as condições de convergência sejam dadas em função do grau do grafo, isto é, em termos de Δ . Consideramos o caso em que G é tal que os vizinhos próximos de qualquer vértice sejam compatíveis dois a dois. Exemplos de grafos desse tipo são árvores ou uma rede cúbica em \mathbb{Z}^d .

Note que para Kotecký-Preiss e Dobrushin, essa nossa escolha de grafo não faz diferença alguma, enquanto para Fernández-Procacci sim, pois esse último leva em conta compatibilidade nos polímeros.

Para analisar o critério de Kotecký-Preiss nesse caso, temos

$$\rho_x \leq \frac{\mu_x}{\exp \left[\sum_{\substack{y \in \mathcal{P} \\ y \sim x}} \mu_y \right]}.$$

Notemos que a condição acima deve ser verificada para todo $x \in \mathcal{P}$, em particular para o polímero que dá a menor cota para ρ_x que é justamente o vértice de grau Δ . Assim, em analogia com o que foi feito no exemplo anterior (modelo Dominó), a condição acima se resume em

$$\rho \leq \mu e^{-(\Delta+1)\mu} \iff \rho \leq \frac{1}{(\Delta+1)e}.$$

A condição de Dobrushin nos dá

$$\rho_x \leq \frac{\mu_x}{\prod_{y \sim x} [1 + \mu_y]} \iff \rho \leq \frac{\mu}{[1 + \mu]^{\Delta+1}}.$$

E de maneira análoga ao exemplo anterior, temos

$$\rho \leq \frac{\frac{1}{\Delta}}{(1 + \frac{1}{\Delta})^{\Delta+1}} = \frac{\Delta^\Delta}{(\Delta+1)^{\Delta+1}} = \frac{1}{(\Delta+1)} \frac{1}{(1 + \frac{1}{\Delta})^\Delta}.$$

Note que, como $(1 + \frac{1}{n})^n \uparrow e$ quando $n \rightarrow \infty$, a condição acima já é um pouco melhor que a condição de Kotecký-Preiss no sentido que ρ pode ser um “pouquinho” maior.

Para a condição de Fernández-Procacci, vamos supor novamente o pior caso em que o polímero x é aquele que possui grau máximo, ou seja, número de incidência em x igual a Δ . Como qualquer quantidade de polímeros y incidentes em x é incompatível com x e compatíveis entre si, para obter $\Xi_{\mathcal{P}_x}(\mu)$, basta escolher a quantidade de polímeros até no máximo Δ e contar suas permutações. Deste modo,

$$\begin{aligned} \Xi_{\mathcal{P}_x}(\mu) &= 1 + \sum_{\substack{y_1 \in \mathcal{P} \\ y_1 \sim x}} \mu_{y_1} + \sum_{n=2}^{\Delta} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{(y_1, \dots, y_n) \in \mathcal{P}^n \\ y_i \sim x, y_i \sim y_j}} \mu_{y_1} \cdots \mu_{y_n} \\ &= 1 + (\Delta+1)\mu + \sum_{n=2}^{\Delta} \frac{1}{n!} n! \binom{\Delta}{n} \mu^n \\ &= \mu + 1 + \Delta\mu + \sum_{n=2}^{\Delta} \binom{\Delta}{n} \mu^n \\ &= \mu + \sum_{n=0}^{\Delta} \binom{\Delta}{n} \mu^n \\ &= \mu + (1 + \mu)^\Delta. \end{aligned}$$

Resultando a condição

$$\rho_x \leq \frac{\mu_x}{\Xi_{\mathcal{P}_x}(\mu)} \iff \rho \leq \frac{\mu}{\mu + (1 + \mu)^\Delta}.$$

E, como no exemplo anterior,

$$\rho \leq \frac{\frac{1}{\Delta-1}}{\frac{1}{\Delta-1} + (1 + \frac{1}{\Delta-1})^\Delta} = \frac{1}{1 + \frac{\Delta^\Delta}{(\Delta-1)^{\Delta-1}}} = \frac{1}{\Delta(1 + \frac{1}{\Delta-1})^{\Delta-1} + 1},$$

que é uma cota melhor que a dos critérios anteriores.

Discutiremos a seguir um modelo que aparece na maioria das aplicações de mecânica estatística e que nos será útil nos modelos que consideramos no decorrer do trabalho.

3.3.3 Modelo de um gás de subconjuntos finitos de um conjunto enumerável

Seja \mathbb{V} um conjunto infinito enumerável. Seja $\mathcal{P}_{\mathbb{V}} = \{R \subset \mathbb{V} : |R| < +\infty\}$ e para quaisquer $\gamma, \gamma' \in \mathcal{P}_{\mathbb{V}}$ diremos que $\gamma \approx \gamma' \iff \gamma \cap \gamma' \neq \emptyset$.

Note que agora os polímeros são subconjuntos de um conjunto enumerável e podemos falar de **tamanho** de um polímero, no sentido de cardinalidade. Isso será tratado com maior atenção, uma vez que já é um modelo mais próximo da realidade, enquanto que os exemplos que discutimos até agora os polímeros eram apenas objetos abstratos satisfazendo determinada relação.

Aqui também, a cada polímero $\gamma \in \mathcal{P}$, associaremos uma atividade ρ_γ . Neste caso, permitimos ρ_γ podendo ser nula, sendo assim $\rho : \mathcal{P}_{\mathbb{V}} \rightarrow [0, \infty)$. Para um sistema de spins, por exemplo, a expansão de polímeros em altas temperaturas é tal que o espaço de polímeros é sempre $\mathcal{P}_{\mathbb{V}}$ para um \mathbb{V} adequado e se tem $\rho_\gamma = 0$ sempre que $|\gamma| = 1$.

Seja $\Lambda \subset \mathbb{V}$ finito. Uma configuração de gás de polímeros em Λ é dada uma vez especificado o espaço de polímeros presentes em Λ . Devemos ter necessariamente que esses polímeros sejam compatíveis aos pares, ou seja, sejam disjuntos. Assim, uma configuração em Λ é uma n -upla não ordenada $\{\gamma_1, \dots, \gamma_n\}$ tal que $\gamma_i \cap \gamma_j = \emptyset$, para todo $i \neq j$ com $i, j = 1, \dots, n$. A função de partição desse modelo é definida por

$$\Xi_\Lambda(\rho) = 1 + \sum_{n \geq 1} \sum_{\substack{\{\gamma_1, \dots, \gamma_n\} : \gamma_i \subset \Lambda \\ \gamma_i \cap \gamma_j = \emptyset}} \rho_{\gamma_1} \cdots \rho_{\gamma_n}. \quad (3.44)$$

Novamente estaremos interessados em estudar a convergência da série $|\Pi|_{\gamma_0}(\rho)$, pois sabemos que sua convergência implica na convergência da pressão do gás. Assim, aplicaremos os três critérios que estudamos para um modelo abstrato, neste caso específico. Começamos por Kotecký-Preiss. Escolhendo $\mu_\gamma = \rho_\gamma e^{a|\gamma|}$, $a > 0$, teremos que a condição $\rho_\gamma \leq r_\gamma^{KP}$, no Teorema 3.3, é

$$\rho_\gamma \leq \frac{\mu_\gamma}{\exp \left[\sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{P} \\ \gamma' \approx \gamma}} \mu_{\gamma'} \right]} \iff \rho_\gamma \leq \frac{\rho_\gamma e^{a|\gamma|}}{\exp \left[\sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{P} \\ \gamma' \approx \gamma}} \rho_{\gamma'} e^{a|\gamma'|} \right]},$$

o que é equivalente a

$$\sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{P} \\ \gamma' \approx \gamma}} \rho_{\gamma'} e^{a|\gamma'|} \leq a|\gamma|, \quad \forall \gamma \in \mathcal{P}. \quad (3.45)$$

Usando que $\gamma' \approx \gamma$, neste modelo, significa $\gamma' \cap \gamma \neq \emptyset$. Seja $\gamma = \{x_1, \dots, x_{|\gamma|}\}$, então

$$\sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{P} \\ \gamma' \cap \gamma \neq \emptyset}} \rho_{\gamma'} e^{a|\gamma'|} \leq \sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{P} \\ x_1 \in \gamma'}} \rho_{\gamma'} e^{a|\gamma'|} + \sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{P} \\ x_2 \in \gamma'}} \rho_{\gamma'} e^{a|\gamma'|} + \dots + \sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{P} \\ x_{|\gamma|} \in \gamma'}} \rho_{\gamma'} e^{a|\gamma'|}.$$

Note que, à direita da desigualdade acima, podemos estar contando o mesmo polímero várias vezes, porém isso não afeta nosso interesse pois estamos majorando a soma do lado esquerdo. Além disso, cada

$$\sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{P} \\ x_i \in \gamma'}} \rho_{\gamma'} e^{a|\gamma'|} \leq \sup_{x \in \mathbb{V}} \left\{ \sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{P}_{\mathbb{V}} \\ x \in \gamma'}} \rho_{\gamma'} e^{a|\gamma'|} \right\}.$$

Portanto,

$$\sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{P} \\ \gamma' \cap \gamma \neq \emptyset}} \rho_{\gamma'} e^{a|\gamma'|} \leq |\gamma| \sup_{x \in \mathbb{V}} \left\{ \sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{P}_{\mathbb{V}} \\ x \in \gamma'}} \rho_{\gamma'} e^{a|\gamma'|} \right\}.$$

A condição (3.45) é satisfeita, desde que,

$$\sup_{x \in \mathbb{V}} \left\{ \sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{P}_{\mathbb{V}} \\ x \in \gamma'}} \rho_{\gamma'} e^{a|\gamma'|} \right\} \leq a. \quad (3.46)$$

Por outro lado, a condição de Dobrushin pode ser escrita como segue,

$$\rho_{\gamma} \leq \frac{\mu_{\gamma}}{\prod_{\substack{\gamma' \in \mathcal{P}_{\mathbb{V}} \\ \gamma' \approx \gamma}} [1 + \mu'_{\gamma}]}$$

Escolhendo $\mu_{\gamma} = \rho_{\gamma} e^{a|\gamma|}$, a condição acima fica,

$$\prod_{\substack{\gamma' \in \mathcal{P}_{\mathbb{V}} \\ \gamma' \approx \gamma}} (1 + \rho_{\gamma'} e^{a|\gamma'|}) \leq e^{a|\gamma|}, \quad \forall \gamma \in \mathcal{P}_{\mathbb{V}},$$

ou de maneira equivalente,

$$\sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{P}_{\mathbb{V}} \\ \gamma' \approx \gamma}} \log(1 + \rho_{\gamma'} e^{a|\gamma'|}) \leq a|\gamma|.$$

De forma análoga à condição de Kotecký-Preiss, essa expressão é sempre válida, se

$$\sup_{x \in \mathbb{V}} \left\{ \sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{P}_{\mathbb{V}} \\ x \in \gamma'}} \log(1 + \rho_{\gamma'} e^{a|\gamma'|}) \right\} \leq a. \quad (3.47)$$

Finalmente, para condição de Fernández-Procacci, novamente escolhendo $\mu_{\gamma} = \rho_{\gamma} e^{a|\gamma|}$, temos

$$\rho_{\gamma} \leq \frac{\mu_{\gamma}}{\Xi_{\mathcal{P}_{\gamma}}(\mu)} \iff \Xi_{\mathcal{P}_{\gamma}}(\mu) \leq e^{a|\gamma|},$$

onde $\mathcal{P}_\gamma = \{\gamma' \in \mathcal{P}_\mathbb{V} : \gamma' \cap \gamma \neq \emptyset\}$ e

$$\Xi_{\mathcal{P}_\gamma}(\mu) = 1 + \sum_{n=1}^{|\gamma|} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}_\mathbb{V} \\ \gamma_i \cap \gamma, \gamma_i \sim \gamma_j}} \prod_{i=1}^n \rho_{\gamma_i} e^{a|\gamma_i|}.$$

Usando que $\gamma_i \sim \gamma_j \iff \gamma_i \cap \gamma_j = \emptyset$, vamos estimar o fator

$$\sum_{\substack{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}_\mathbb{V} \\ \gamma_i \cap \gamma, \gamma_i \sim \gamma_j}} \prod_{i=1}^n \rho_{\gamma_i} e^{a|\gamma_i|}.$$

Note que, fixado um subconjunto $\gamma \subset \mathbb{V}$, cujo número de elementos é $|\gamma|$, não podemos escolher n subconjuntos γ_i que intersectem γ e sejam disjuntos entre si caso $n > |\gamma|$, pois para isso ser possível, devemos ter no máximo que cada γ_i contenha um elemento de γ . Deste modo, para $n > |\gamma|$, o fator que queremos estimar vale 0, enquanto que, para $n \leq |\gamma|$, temos

$$\sum_{\substack{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}_\mathbb{V} \\ \gamma_i \cap \gamma, \gamma_i \sim \gamma_j}} \prod_{i=1}^n \rho_{\gamma_i} e^{a|\gamma_i|} \leq \sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{P} \\ x_1 \in \gamma'}} \rho_{\gamma'} e^{a|\gamma'|} \sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{P} \\ \gamma' \ni x_2 \setminus x_1}} \rho_{\gamma'} e^{a|\gamma'|} \dots \sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{P} \\ \gamma' \ni x_n \setminus \{x_1, \dots, x_{n-1}\}}} \rho_{\gamma'} e^{a|\gamma'|},$$

onde $\{x_1, \dots, x_n\} \subset \gamma$. Como observado anteriormente

$$\sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{P} \\ x_i \in \gamma'}} \rho_{\gamma'} e^{a|\gamma'|} \leq \sup_{x \in \mathbb{V}} \left\{ \sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{P}_\mathbb{V} \\ x \in \gamma'}} \rho_{\gamma'} e^{a|\gamma'|} \right\},$$

e observamos que podemos escolher $|\gamma|$ polímeros contendo exatamente um ponto x_1 de γ ; em seguida, podemos escolher $|\gamma| - 1$ polímeros contendo exatamente um ponto x_2 de γ diferente daquele escolhido inicialmente e continuando até o passo n , podemos escolher $|\gamma| - n + 1$ polímeros contendo exatamente um ponto de γ diferente dos $n - 1$ já escolhidos, de modo a satisfazer que esses polímeros sejam todos incompatíveis com γ e compatíveis aos pares. Assim segue que

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}_\mathbb{V} \\ \gamma_i \cap \gamma, \gamma_i \sim \gamma_j}} \prod_{i=1}^n \rho_{\gamma_i} e^{a|\gamma_i|} &\leq |\gamma|(|\gamma| - 1) \cdots (|\gamma| - n + 1) \left[\sup_{x \in \mathbb{V}} \left\{ \sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{P}_\mathbb{V} \\ x \in \gamma'}} \rho_{\gamma'} e^{a|\gamma'|} \right\} \right]^n \\ &= \binom{|\gamma|}{n} n! \left[\sup_{x \in \mathbb{V}} \left\{ \sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{P}_\mathbb{V} \\ x \in \gamma'}} \rho_{\gamma'} e^{a|\gamma'|} \right\} \right]^n. \end{aligned}$$

Portanto,

$$\begin{aligned}\Xi_{\mathcal{P}_\gamma}(\mu) &\leq 1 + \sum_{n=1}^{|\gamma|} \binom{|\gamma|}{n} \left[\sup_{x \in \mathbb{V}} \left\{ \sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{P}_\mathbb{V} \\ x \in \gamma'}} \rho_{\gamma'} e^{a|\gamma'|} \right\} \right]^n \\ &= \left[1 + \sup_{x \in \mathbb{V}} \left\{ \sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{P}_\mathbb{V} \\ x \in \gamma'}} \rho_{\gamma'} e^{a|\gamma'|} \right\} \right]^{|\gamma|}.\end{aligned}$$

E, desta forma, temos que a condição de Fernández-Procacci é satisfeita, se

$$\left[1 + \sup_{x \in \mathbb{V}} \left\{ \sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{P}_\mathbb{V} \\ x \in \gamma'}} \rho_{\gamma'} e^{a|\gamma'|} \right\} \right]^{|\gamma|} \leq e^{a|\gamma|},$$

ou equivalentemente,

$$\sup_{x \in \mathbb{V}} \left\{ \sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{P}_\mathbb{V} \\ x \in \gamma'}} \rho_{\gamma'} e^{a|\gamma'|} \right\} \leq e^a - 1. \quad (3.48)$$

Do Teorema 3.1, sabemos que $|\Pi|_\gamma(\rho) \leq \Xi_{\mathcal{P}_\gamma}(\mu)$, logo temos também a cota superior

$$|\Pi|_\gamma(\rho) \leq e^{a|\gamma|}.$$

Temos assim provado o seguinte resultado

Teorema 3.4. *Seja \mathbb{V} um conjunto enumerável e seja $\mathcal{P}_\mathbb{V} = \{\gamma \subset \mathbb{V} : |\gamma| < \infty\}$ o espaço de polímeros com relação de incompatibilidade $\gamma \approx \gamma' \iff \gamma \cap \gamma' \neq \emptyset$ e atividade $\xi(\gamma)$. Assuma que exista um número positivo $a > 0$ tal que para todo $x \in \mathbb{V}$,*

$$\sum_{\substack{\gamma \in \mathcal{P}_\mathbb{V} \\ x \in \gamma}} |\xi_\gamma| e^{a|\gamma|} \leq e^a - 1. \quad (3.49)$$

Então, para todo subconjunto finito Λ de \mathbb{V} , temos que $\frac{1}{|\Lambda|} \log \Xi_\Lambda(\xi)$, onde $\Xi_\Lambda(\xi)$ é a função de partição definida em (3.44), pode ser escrita como uma série uniforme e absolutamente convergente em Λ .

3.4 Modelo de Ising em altas temperaturas

Relembramos aqui alguns fatos sobre este modelo que serão úteis nesta seção, mas se for de interesse do leitor ele pode voltar à Seção 2.2 do Capítulo 2 deste trabalho para ter mais detalhes. Dada uma configuração σ_Λ do sistema em Λ , a energia de tal configuração é dada pelo

Hamiltoniano

$$H_\Lambda(\sigma_\Lambda) = -J \sum_{\substack{|x-y|=1 \\ \{x,y\} \subset \Lambda}} \sigma_x \sigma_y - h \sum_{x \in \Lambda} \sigma_x + \mathcal{B}(\sigma_\Lambda),$$

onde h é um “campo magnético externo”, J é uma constante e $\mathcal{B}(\sigma_\Lambda)$ representa a interação dos spins dentro da caixa Λ com o exterior da caixa. Note que $\mathcal{B}(\sigma_\Lambda)$ pode ser tomado arbitrariamente uma vez que a energia livre termodinâmica, ou equivalentemente a pressão, do modelo de Ising independe das condições de fronteira, como mostrado na Seção 2.2.

Desenvolveremos agora uma expansão em polímeros, em altas temperaturas, para a função de partição do modelo de Ising bidimensional com $h = 0$. Vamos supor agora que Λ é um quadrado de lado L e, portanto, contendo L^2 sítios na rede. Também assumiremos condição de fronteira livre, ou seja, $\mathcal{B}(\sigma_\Lambda) = 0$. Desta forma, o Hamiltoniano de campo magnético nulo e condição de fronteira livre para o modelo de Ising é

$$H_\Lambda(\sigma_\Lambda) = -J \sum_{\substack{|x-y|_1=1 \\ \{x,y\} \subset \Lambda}} \sigma_x \sigma_y = -J \sum_{b \in B(\Lambda)} \tilde{\sigma}_b,$$

onde $B(\Lambda)$ é o conjunto de todos os pares de vizinhos próximos em Λ . Portanto, $|B(\Lambda)| = 2L(L-1)$. Para $b = \{x, y\}$ denotamos $\tilde{\sigma}_b = \sigma_x \sigma_y$.

A função de partição, em termos de β (inverso da temperatura), é dada por

$$Z_\Lambda(\beta) = Z_\Lambda(\beta, 0) = \sum_{\sigma_\Lambda \subset \Lambda} \prod_{b \in B(\Lambda)} e^{\beta J \tilde{\sigma}_b}.$$

Note que $\tilde{\sigma}_b = \pm 1$, então

$$e^{\beta J \tilde{\sigma}_b} = \cosh \beta J \tilde{\sigma}_b + \sinh \beta J \tilde{\sigma}_b = \cosh \beta J + \tilde{\sigma}_b \sinh \beta J = \cosh \beta J [1 + \tilde{\sigma}_b \tanh \beta J].$$

Logo,

$$\begin{aligned} Z_\Lambda(\beta) &= [\cosh \beta J]^{|B(\Lambda)|} \sum_{\sigma_\Lambda \subset \Lambda} \prod_{b \in B(\Lambda)} [1 + \tilde{\sigma}_b \tanh \beta J] \\ &= [\cosh \beta J]^{|B(\Lambda)|} \sum_{\sigma_\Lambda \subset \Lambda} \sum_{E \subset B(\Lambda)} \prod_{b \in E} \tilde{\sigma}_b \tanh \beta J \quad (\text{lembrando da expansão de Mayer}) \\ &= [\cosh \beta J]^{|B(\Lambda)|} \sum_{E \subset B(\Lambda)} [\tanh \beta J]^{|E|} \sum_{\sigma_\Lambda \subset E} \prod_{b \in E} \tilde{\sigma}_b. \end{aligned}$$

Definindo $I(i, E) = \#\{j \in \mathbb{Z}^d : \{i, j\} \in E\}$, ou seja, $I(i, E)$ é o número de incidência de elos no sítio i , podemos reescrever o $\prod_{b \in E} \tilde{\sigma}_b$ de forma desacoplada, isto é, avaliando cada sítio separadamente. Note que, neste produto, existem tantos termos σ_i , quantos forem os elos incidentes no sítio i .

Portanto,

$$Z_\Lambda(\beta) = [\cosh \beta J]^{|B(\Lambda)|} \sum_{E \subset B(\Lambda)} [\tanh \beta J]^{|E|} \sum_{\sigma_\Lambda \subset E} \prod_{i \in \Lambda} \sigma_i^{I(i, E)}. \quad (3.50)$$

Note que podemos somar sobre as configurações separadamente em cada vértice $i \in E$ (em particular em Λ , tomando a incidência sendo zero), com isso desacoplamos os spins:

$$\sum_{(\sigma_1, \dots, \sigma_{|V_E|}) \subset E} \prod_{i \in V_E} \sigma_i^{I(i,E)} = \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \sigma_1^{I(1,E)} \sum_{\sigma_2 = \pm 1} \sigma_2^{I(2,E)} \dots \sum_{\sigma_{|V_E|} = \pm 1} \sigma_{|V_E|}^{I(|V_E|,E)} = \prod_{i \in V_E} \sum_{\sigma_i = \pm 1} \sigma_i^{I(i,E)}.$$

Temos ainda,

$$\sum_{\sigma_i = \pm 1} \sigma_i^{I(i,E)} = \begin{cases} 2, & \text{se } I(i,E) \text{ é par;} \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

e assim a equação (3.50) fica,

$$Z_\Lambda(\beta) = [\cosh \beta J]^{2L(L-1)} 2^{L^2} \sum_{E \subset B(\Lambda): I(i,E) \text{ é par } \forall i \in \Lambda} [\tanh \beta J]^{|E|}. \quad (3.51)$$

A cada E está associado um grafo em Λ que pode ser conexo ou não. Dado um grafo qualquer, podemos dividi-lo em componentes conexas disjuntas e a cada uma dessas componentes chamaremos de **animal na rede**. A Figura 3.6 mostra um exemplo de grafo com 3 componentes conexas, ou seja, 3 animais na rede.

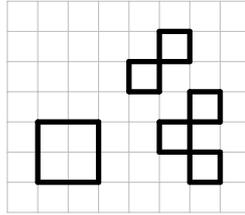


Figura 3.6: Animais na rede.

Denotaremos um animal na rede como um grafo conexo $\gamma = \{\lambda_1, \dots, \lambda_k\}$, onde $\lambda = \{x, y\}$ é uma ligação de vizinhos próximos presentes em γ . Note que, por serem conexos e estarmos considerando condições de fronteira livre, os animais na rede que contribuem para a função de partição são aqueles γ em que o número de incidência em qualquer um dos seus sítios seja 2 ou 4 (Figura 3.7), enquanto todos os outros grafos não contribuem (Figura 3.8).

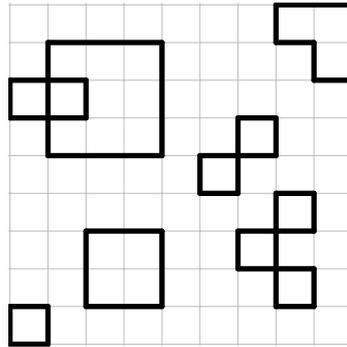


Figura 3.7: Um grafo que contribui possuindo seis componentes conexas.

temos

$$\Xi_{\mathcal{L}_\gamma}(\mu) \leq e^{a|\gamma|}, \quad (3.53)$$

onde

$$\Xi_{\mathcal{L}_\gamma}(\mu) = 1 + \sum_{n=1}^{|V_\gamma|} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{L}_\gamma^n \\ |\gamma_i| \geq 4; \gamma_i \sim \gamma_j}} \prod_{i=1}^n \xi_{\gamma_i} e^{a|\gamma_i|}.$$

Analisando o fator

$$\sum_{\substack{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{L}_\gamma^n \\ |\gamma_i| \geq 4; \gamma_i \sim \gamma_j}} \prod_{i=1}^n \xi_{\gamma_i} e^{a|\gamma_i|},$$

temos que escolher n animais na rede que sejam incompatíveis com um animal dado γ e que sejam compatíveis aos pares. Como dois animais são incompatíveis se eles compartilham pelo menos um vértice de \mathbb{Z}^2 , percebemos que o fator acima é zero se $n > |V_\gamma|$. Por outro lado, para $n \leq |V_\gamma|$, podemos cotar superiormente este fator por

$$\sum_{\substack{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{L}_\gamma^n \\ |\gamma_i| \geq 4; \gamma_i \sim \gamma_j}} \prod_{i=1}^n \xi_{\gamma_i} e^{a|\gamma_i|} \leq |V_\gamma|(|V_\gamma| - 1) \cdots (|V_\gamma| - n + 1) \left[\sup_{\substack{x \in \mathbb{Z}^2 \\ x \in \gamma'}} \sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{L} \\ x \in \gamma'}} \xi_{\gamma'} e^{a|\gamma'|} \right]^n.$$

Implicando assim em

$$\Xi_{\mathcal{L}_\gamma}(\mu) \leq 1 + \sum_{n=1}^{|V_\gamma|} \binom{|V_\gamma|}{n} \left[\sup_{\substack{x \in \mathbb{Z}^2 \\ x \in \gamma'}} \sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{L} \\ x \in \gamma'}} \xi_{\gamma'} e^{a|\gamma'|} \right]^n = \left[1 + \sup_{\substack{x \in \mathbb{Z}^2 \\ x \in \gamma'}} \sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{L} \\ x \in \gamma'}} \xi_{\gamma'} e^{a|\gamma'|} \right]^{|V_\gamma|}.$$

Portanto, teremos (3.53) satisfeita, se

$$\left[1 + \sup_{\substack{x \in \mathbb{Z}^2 \\ x \in \gamma'}} \sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{L} \\ x \in \gamma'}} \xi_{\gamma'} e^{a|\gamma'|} \right]^{|V_\gamma|} \leq e^{a|\gamma|}.$$

Uma vez que, qualquer sítio em γ possui incidência 2 ou 4, temos que $|V_\gamma| \leq |\gamma|$, valendo a igualdade apenas quando γ é um ciclo. Logo,

$$\sup_{\substack{x \in \mathbb{Z}^2 \\ x \in \gamma'}} \sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{L} \\ x \in \gamma'}} \xi_{\gamma'} e^{a|\gamma'|} \leq e^a - 1. \quad (3.54)$$

Considere

$$f(x) = \sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{L} \\ x \in \gamma'}} \xi_{\gamma'} e^{a|\gamma'|},$$

por invariância translacional $f(x)$ é constante. Desta forma, podemos tomar $x = 0$, a origem em

\mathbb{Z}^2 e (3.54) se resume em

$$\sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{L} \\ 0 \in \gamma'}} \xi_{\gamma'} e^{a|\gamma'|} \leq e^a - 1. \quad (3.55)$$

A equação acima trata-se de uma condição, em altas temperaturas, para a analiticidade da energia livre do modelo Ising num campo magnético nulo e condição de fronteira livre. Relembrando a definição de $\xi_{\gamma'}$, temos

$$\sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{L} \\ 0 \in \gamma'}} [\tanh \beta J]^{|\gamma'|} e^{a|\gamma'|} = \sum_{n \geq 4} [\tanh \beta J]^n e^{an} \sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{L} \\ 0 \in \gamma': |\gamma'|=n}} 1 = \sum_{n \geq 4} [\tanh \beta J]^n e^{an} C_n.$$

A constante C_n conta os animais na rede que passam pelo 0 cujos números de elos são n , mas note que partindo de um ponto, temos 4 direções possíveis de serem tomadas inicialmente e, em seguida, temos 3 possibilidades de direções enquanto que na última, como deve formar uma curva fechada no plano, só há uma possibilidade. Assim, $C_n = 4 \cdot 3 \cdot \dots \cdot 3 \cdot 1 \leq 3^n$ e temos que (3.55) é certamente satisfeita se

$$\sum_{n \geq 4} [3 \tanh \beta J]^n e^{an} \leq e^a - 1, \quad (3.56)$$

onde, fazendo $x = 3 \tanh \beta J$, equivale a

$$\sum_{n \geq 4} [xe^a]^n = x^4 e^{4a} \left[\sum_{n \geq 0} (xe^a)^n \right] \leq e^a - 1,$$

se $xe^a < 1$, comparando com a série geométrica, a expressão acima é equivalente à

$$\frac{x^4 e^{4a}}{1 - xe^a} \leq e^a - 1,$$

ou

$$x^4 e^{4a} + (e^{2a} - e^a)x - (e^a - 1) \leq 0.$$

Tomando $a = 0.21$, resolvemos numericamente a condição acima e, voltando o valor de x , temos

$$3 \tanh \beta J \leq 0.4577.$$

Logo, temos a convergência da energia livre, uniformemente em Λ , desde que

$$\beta \leq \beta_0 \doteq \frac{1}{J} \arctan(0.1525) \approx \frac{0.1525}{J}.$$

A título de comparação faremos a análise de convergência através do critério de Kotecký-Preiss, que consiste em tomar $\mu_\gamma = \xi_\gamma e^{a|\gamma|}$,

$$\xi_\gamma \leq \frac{\mu_\gamma}{e^{\sum_{\gamma' \sim \gamma} \mu_{\gamma'}}} \iff \sum_{\gamma' \sim \gamma} \xi_{\gamma'} e^{a|\gamma'|} \leq a|\gamma|. \quad (3.57)$$

Novamente, $\gamma' \approx \gamma \iff \text{supp}\gamma' \cap \text{supp}\gamma \neq \emptyset$. Podemos então escrever,

$$\sum_{\gamma' \approx \gamma} \xi_{\gamma'} e^{a\gamma'} \leq |V_\gamma| \sup_{x \in \mathbb{Z}^2} \sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{L} \\ x \in \gamma'}} \xi_{\gamma'} e^{a|\gamma'|},$$

de modo que a equação (3.57) é satisfeita se também o for

$$|V_\gamma| \sup_{x \in \mathbb{Z}^2} \sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{L} \\ x \in \gamma'}} \xi_{\gamma'} e^{a|\gamma'|} \leq a|\gamma|.$$

Usando que $|V_\gamma| \leq |\gamma|$, certamente a desigualdade acima é válida se

$$\sup_{x \in \mathbb{Z}^2} \sum_{\substack{\gamma' \in \mathcal{L} \\ x \in \gamma'}} \xi_{\gamma'} e^{a|\gamma'|} \leq a. \quad (3.58)$$

Fazendo as mesmas observações que o caso anterior temos,

$$x^4 e^{4a} + e^a x - a \leq 0.$$

Para $a = 0.21$, teremos

$$3 \tanh \beta J \leq 0.1687 \implies \tanh \beta J \leq \frac{0.1687}{3} = 0.0562.$$

Portanto a energia livre é convergente uniformemente em Λ , para Kotecký-Preiss, desde que

$$\beta \leq \beta_0 \doteq \frac{1}{J} \arctan(0.0562) \approx \frac{0.0563}{J}.$$

Comparando com o resultado de Fernández-Procacci, vemos que a cota de Kotecký-Preiss para β é pior e com isso acabamos a análise do modelo de Ising em altas temperaturas.

Capítulo 4

Modelos de Spins na rede \mathbb{Z}^d

Denotamos por \mathbb{Z}^d a rede unitária d -dimensional, isto é, um elemento $x \in \mathbb{Z}^d$ é uma d -úpla $x = (n_1, \dots, n_d)$; $n_i \in \mathbb{Z}$. Nós consideramos \mathbb{Z}^d imerso, de forma natural, em \mathbb{R}^d . Seja Λ um subconjunto finito de \mathbb{Z}^d , que usualmente o tomamos como sendo o conjunto $\Lambda = \{(n_1, \dots, n_d) : n_i \in \mathbb{Z}; \frac{-L}{2} \leq n_i \leq \frac{L}{2}; \forall i = 1, \dots, d\}$, ou seja, todos os sítios (vértices) da rede unitária dentro de um cubo com centro na origem e lado L . A definição de um *sistema de spins* em \mathbb{Z}^d é dada associando a cada sítio $x \in \Lambda$ uma variável ϕ_x , o “spin” no sítio x . O spin ϕ_x assume valores em algum espaço Ω equipado com uma medida de probabilidade $d\mu(\phi_x)$ e com a norma $\|\phi_x\|$. O espaço de spin único Ω depende do tipo de sistema que estamos tratando e, em geral, sua estrutura pode ser muito complicada e diferente de caso para caso. A medida de probabilidade $d\mu(\phi_x)$ é às vezes chamada de *distribuição a priori de spin único*. A escolha mais simples do espaço Ω é assumir que ele é um conjunto finito, com $d\mu$ assumindo igual probabilidade para qualquer valor de spin no conjunto Ω . Por exemplo, a escolha $\Omega = \{+1, -1\}$ (ou seja, o spin ϕ_x em um sítio x pode tomar apenas os valores $\phi_x = \pm 1$) e $d\mu(\phi_x) = \frac{1}{2}\delta_{\phi_x, +1} + \frac{1}{2}\delta_{\phi_x, -1}$ (ou seja, a probabilidade do spin assumir o valor $+1$ é $\frac{1}{2}$ assim como também a probabilidade de assumir -1) corresponde a *sistemas tipo Ising*. Para tais sistemas a variável aleatória ϕ_x é usualmente denotada na literatura por σ_x e quando $\sigma_x = 1$, costuma-se dizer que o spin é “up” e quando $\sigma_x = -1$ o spin é chamado “down”.

A escolha $\Omega = \{0, +1\}$ e $d\mu(\phi_x) = \frac{1}{2}\delta_{\phi_x, +1} + \frac{1}{2}\delta_{\phi_x, 0}$ corresponde ao chamado *gás de Rede*. Neste caso a variável ϕ_x é usualmente denotada por n_x e interpretada como um número de ocupação, isto é, se $n_x = 1$ então dizemos que uma partícula está presente no sítio x e este sítio está ocupado, enquanto que $n_x = 0$ a partícula não está presente e o sítio não está ocupado.

A escolha $\Omega = \{1, 2, \dots, q\}$, com $q \in \mathbb{Z}^+$, e $d\mu(\phi_x) = \frac{1}{q}[\delta_{\phi_x, +1} + \dots + \delta_{\phi_x, q}]$ corresponde ao chamado *modelo Potts* com q estados.

Uma escolha menos simples para Ω é assumir que ele seja um conjunto infinito, porém compacto. Um exemplo típico é o modelo clássico de Heisenberg, onde $\Omega = \{\phi_x \in \mathbb{R}^d : \|\phi_x\| = 1\}$, isto é, Ω é a esfera unitária d -dimensional, e a medida de probabilidade $d\mu(\phi_x) = [\text{volume } \Omega]^{-1}d\Omega(\phi_x)$, onde $d\Omega(\phi_x)$ é a medida de Lebesgue usual na esfera.

Sistemas de spins para os quais Ω é um espaço compacto, são usualmente chamados de *sistemas de spins limitados*. Mas podemos também considerar o caso em que Ω não é um espaço compacto. Sistemas de spin para os quais o espaço de spin único não é compacto são, em geral, conhecidos como *sistemas de spin não limitados*. Geralmente, sistemas de spins limitados podem

ser tratados mais facilmente.

Dado $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ finito, consideramos nosso sistema de spins restrito a este conjunto Λ . Assim, uma configuração ϕ_Λ do sistema restrito a Λ é dado uma vez que tenha sido especificado o valor de $\phi_x \in \Omega$ para todo $x \in \Lambda$. ϕ_Λ é um elemento do espaço de configurações restrito a Λ , $\Phi_\Lambda = \prod_{x \in \Lambda} \Omega_x$. Agora a medida produto $d\mu(\phi_\Lambda) = \prod_{x \in \Lambda} d\mu(\phi_x)$ em Φ_Λ é rigorosamente definida sem grandes dificuldades. Se X é qualquer subconjunto de Λ , Φ_Λ e $d\mu(\phi_X)$ são definidos de maneira trivial.

Uma interação é dada uma vez que, para cada subconjunto *finito* $X \subset \mathbb{Z}^d$, especificamos uma função de valores reais $\Psi(X, \phi_X)$, chamada *interação de muitos corpos*, que depende em geral do conjunto X e dos valores de spins ϕ_x para cada sítio $x \in X$. Consideraremos apenas interações em pares, isto é, $\Psi(X, \phi_X) = 0$ sempre que $|X| \neq 2$. Assim teremos interações da forma $\Psi(\{x, y\}, \phi_x, \phi_y)$, para $x, y \in \mathbb{Z}^d$.

Suporemos existir uma função positiva $J(x, y)$ tal que

$$|\Psi(\{x, y\}, \phi_x, \phi_y)| \leq J(\{x, y\}) \|\phi_x\| \|\phi_y\| \quad (4.1)$$

e

$$\sup_{x \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\substack{y \in \mathbb{Z}^d \\ y \neq x}} J(\{x, y\}) = D < +\infty \quad (4.2)$$

Exemplos de funções $J(\{x, y\})$ que satisfazem essas condições são $J(\{x, y\}) = \frac{1}{|x-y|^{d+\epsilon}}$ e $J(\{x, y\}) = J\delta_{xy:|x-y|=1}$, onde J uma constante positiva. O último exemplo é o caso do modelo de Ising. Podemos com isto cobrir um número grande de modelos e aplicar as considerações que discutiremos neste capítulo.

Uma vez dada Ψ com as propriedades acima, podemos construir o Hamiltoniano do sistema. Fixemos uma configuração de spins ϕ_Λ^c fora da caixa Λ , ou seja, no conjunto $\Lambda^c = \mathbb{Z}^d - \Lambda$. Isto equivale a especificarmos uma condição de fronteira para o sistema no interior da caixa Λ . Essa escolha é totalmente livre no caso de spins limitados. Uma vez especificada ϕ_Λ^c podemos definir, para qualquer ϕ_Λ , o Hamiltoniano do sistema por

$$H^{\phi_\Lambda^c}(\phi_\Lambda) = \sum_{\{x, y\} \cap \Lambda \neq \emptyset} \Psi(\{x, y\}, \phi_x, \phi_y).$$

A quantidade acima fornece a energia associada à configuração ϕ_Λ do sistema de spins, fixada ϕ_Λ^c .

Note que

$$H^{\phi_\Lambda^c}(\phi_\Lambda) = H_{bulk}(\phi_\Lambda) + W(\phi_\Lambda, \phi_\Lambda^c),$$

onde $H_{bulk}(\phi_\Lambda) = \sum_{\{x, y\} \subset \Lambda} \Psi(\{x, y\}, \phi_x, \phi_y)$ representa a energia associada aos spins em Λ , enquanto $W(\phi_\Lambda, \phi_\Lambda^c) = \sum_{x \in \Lambda} \sum_{y \in \Lambda^c} \Psi(\{x, y\}, \phi_x, \phi_y)$ representa a energia da interação entre os spins de Λ e Λ^c .

A partir das equações (4.1) e (4.2), temos

$$\begin{aligned}
|W(\phi_\Lambda, \phi_{\Lambda^c})| &\leq \sum_{x \in \Lambda} \|\phi_x\| \sum_{y \in \Lambda^c} J(\{x, y\}) \|\phi_y\| \\
&\leq C \sum_{x \in \Lambda} \sum_{y \in \Lambda^c} J(\{x, y\}) \\
&\leq CD \sum_{x \in \Lambda} 1 \\
&= CD|\Lambda|,
\end{aligned}$$

onde $C = \sup_{x \in \Lambda} \|\phi_x\| \cdot \sup_{y \in \Lambda^c} \|\phi_y\|$ e D vem da condição (4.2). Note que estamos supondo o sistema com spins limitados.

A *função de partição* do sistema é dada por

$$Z_\Lambda(\beta) = \int d\mu(\phi_\Lambda) e^{-\beta \sum_{\{x, y\} \cap \Lambda \neq \emptyset} \Psi(\{x, y\}, \phi_x, \phi_y)}. \quad (4.3)$$

A *energia livre* termodinâmica do sistema é definida por

$$f(\beta) = \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda|} \log Z_\Lambda(\beta), \quad (4.4)$$

onde $\Lambda \rightarrow \infty$ é interpretado no sentido de Van Hove. Como o limite acima não depende da condição de fronteira, podemos tomá-la livre.

Mostraremos em seguida que $\log Z_\Lambda(\beta)$ pode sempre ser escrita em termos de uma expansão em série formal que converge absolutamente, se β é suficiente pequeno. Devido a isto, esta expansão é denominada *expansão a altas temperaturas*.

Relembrando o “truque” da expansão de Mayer que utilizamos para o gás de polímeros abstrato, reescrevemos (4.3), com condição de fronteira livre, da seguinte forma

$$\begin{aligned}
Z_\Lambda(\beta) &= \int d\mu(\phi_\Lambda) \prod_{\{x, y\} \subset \Lambda} \left[(e^{-\beta \Psi(\{x, y\}, \phi_x, \phi_y)} - 1) + 1 \right] \\
&= 1 + \int d\mu(\phi_\Lambda) \sum_{g \in \mathcal{G}_\Lambda} \prod_{\{x, y\} \in E_g} (e^{-\beta \Psi(\{x, y\}, \phi_x, \phi_y)} - 1),
\end{aligned}$$

onde \mathcal{G}_Λ são os grafos conexos ou não em Λ . O fator 1 é obtido, por convenção, a partir do grafo vazio e por $\int d\mu(\phi_\Lambda) 1 = 1$.

Passando à partições de Λ para avaliarmos a soma sobre grafos em componentes conexas, ainda com a convenção que grafos vazios contribuem com o fator 1, temos

$$\sum_{g \in \mathcal{G}_\Lambda} (\dots) = \sum_{\substack{\{R_1, \dots, R_k\} \subset \Lambda \\ R_i \cap R_j = \emptyset; |R_i| \geq 2}} \prod_{i=1}^k \sum_{g \in \mathcal{G}_{R_i}} (\dots),$$

com $\{R_1, \dots, R_k\}$ uma k -úpla de subconjuntos mutuamente disjuntos em Λ . Como $d\mu(\phi_\Lambda)$ é uma

medida produto, $d\mu(\phi_\Lambda) = \prod_{x \in \Lambda} d\mu(\phi_x)$, temos que

$$\int d\mu(\phi_\Lambda) \sum_{g \in \mathcal{G}_\Lambda} \prod_{\{x,y\} \in E_g} (e^{-\beta\Psi(\{x,y\}, \phi_x, \phi_y)} - 1) = \sum_{\substack{\{R_1, \dots, R_k\} \subset \Lambda \\ R_i \cap R_j = \emptyset; |R_i| \geq 2}} \rho_\beta(R_1) \cdots \rho_\beta(R_k),$$

com a atividade do polímero dada por

$$\rho_\beta(R) = \prod_{x \in R} \int d\mu(\phi_x) \sum_{g \in \mathcal{G}_R} \prod_{\{x,y\} \in E_g} (e^{-\beta\Psi(x,y, \phi_x, \phi_y)} - 1). \quad (4.5)$$

Visto que

$$\sum_{\substack{\{R_1, \dots, R_k\} \subset \Lambda \\ R_i \cap R_j = \emptyset; |R_i| \geq 2}} \rho_\beta(R_1) \cdots \rho_\beta(R_k) = \sum_{k \geq 1} \frac{1}{k!} \sum_{\substack{(R_1, \dots, R_k) \in \Lambda^k \\ R_i \cap R_j = \emptyset \text{ e } |R_i| \geq 2}} \rho_\beta(R_1) \cdots \rho_\beta(R_k),$$

obtemos a função de partição (4.3) escrita como uma função de partição grã-canônica para o gás de polímeros abstrato, onde os polímeros são subconjuntos de Λ com cardinalidade maior ou igual que 2, relação de incompatibilidade dada pela interseção não vazia e atividade dada por (4.5)

$$Z_\Lambda(\beta) = 1 + \sum_{k \geq 1} \frac{1}{k!} \sum_{\substack{(R_1, \dots, R_k) \in \Lambda^k \\ R_i \cap R_j = \emptyset \text{ e } |R_i| \geq 2}} \rho_\beta(R_1) \cdots \rho_\beta(R_k), \quad (4.6)$$

que pode ainda ser vista como a função de partição de um potencial tipo *hard core*,

$$Z_\Lambda(\beta) = 1 + \sum_{k \geq 1} \frac{1}{k!} \sum_{\substack{(R_1, \dots, R_k) \in \Lambda^k \\ |R_i| \geq 2}} \rho_\beta(R_1) \cdots \rho_\beta(R_k) e^{-\sum_{1 \leq i < j \leq k} U(R_i, R_j)},$$

com

$$U(R_i, R_j) = \begin{cases} 0, & \text{se } R_i \cap R_j = \emptyset; \\ +\infty, & \text{se } R_i \cap R_j \neq \emptyset. \end{cases}$$

Podemos assim, aplicar os critérios que estudamos em 3.2.3 e analisar a convergência de (4.6) e, conseqüentemente, obter informação sobre a analiticidade da energia livre (4.4).

Aplicando o critério de Kotecký-Preiss (3.46), devemos ter que

$$\sup_{\substack{x \in \mathbb{Z}^d \\ R \subset \Lambda \\ x \in R}} \sum |\rho_R| e^{a|R|} \leq a \iff \sum_{n=2}^{\infty} \left[\sup_{x \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\substack{R \subset \Lambda \\ x \in R: |R|=n}} |\rho_R| \right] e^{an} \leq a.$$

Fazendo $a = 1$ temos,

$$\sum_{n=2}^{\infty} \left[\sup_{x \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\substack{R \subset \Lambda \\ x \in R: |R|=n}} |\rho_R| \right] e^n \leq 1. \quad (4.7)$$

Nessa direção temos o seguinte resultado,

Teorema 4.1. *Dado um sistema de spins como o considerado aqui, tal que*

$$|\Psi(\{x, y\}, \phi_x, \phi_y)| \leq J(\{x, y\}) \quad (4.8)$$

e

$$\sup_{\substack{x \in \mathbb{Z}^d \\ y \in \mathbb{Z}^d \\ y \neq x}} J(\{x, y\}) \leq J < +\infty \quad (4.9)$$

ou equivalentemente,

$$\sum_{\{x, y\} \subset R} \Psi(x, y, \phi_x, \phi_y) \geq -|R|J, \quad \forall R, \quad (4.10)$$

então, a condição (4.7) é satisfeita e $\frac{1}{|\Lambda|} \log Z_\Lambda(\beta)$ é uma série absolutamente convergente, uniformemente em Λ para β tal que:

$$\beta \leq \frac{0.016}{J}.$$

Note que (4.8) e (4.9) são satisfeitas para os sistemas de spins limitados mais populares como modelos tipo Ising, modelo *Potts* e o modelo de Heisenberg.

Demonstração: A condição (4.10) do teorema nos diz que o potencial de interação em pares $\Psi(x, y, \phi_x, \phi_y)$ é um potencial estável, o que nos permite usar o Corolário 4.5 em [19], para limitarmos a atividade $|\rho_R|$, dada por (4.5) (obs. $V_{ii} = \beta J$, para todo i). O corolário afirma que, para um potencial em pares estável V_{ij} assumindo valores reais, vale o seguinte:

$$\left| \sum_{g \in G_R} \prod_{\{i, j\} \in E_g} (e^{-V_{ij}} - 1) \right| \leq e^{\sum_{i=1}^n V_{ii}} \sum_{\tau \in T_n} \prod_{\{i, j\} \in \tau} |V_{ij}|,$$

onde T_n é o conjunto de todas as árvores enraizadas com $n + 1$ vértices, sendo 0 a raiz.

Usaremos ainda que, ao somar sobre R contendo um ponto x e $|R| = n$, podemos dizer que $R = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ e tomar o ponto x como sendo, sem perda de generalidade, o primeiro elemento de R , ou seja, $x_1 = x$. Como temos n posições para escolher uma a ser ocupada por x , temos um fator de multiplicação n ao efetuar essa restrição. Desta forma,

$$\sum_{\substack{R \subset \Lambda \\ x \in R: |R|=n}} |\rho_R| = \sum_{\substack{\{x_1, \dots, x_n\} \subset \Lambda \\ x = x_j}} |\rho_{\{x_1, \dots, x_n\}}| = \frac{n}{n!} \sum_{\substack{(x_1 = x, \dots, x_n) \in \Lambda^n \\ x_i \neq x_j}} |\rho_{\{x_1, \dots, x_n\}}|.$$

Assim,

$$\begin{aligned}
& \sup_{x \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\substack{R \subset \Lambda \\ x \in R: |R|=n}} \left| \prod_{z \in R} \int d\mu(\phi_z) \sum_{g \in G_R} \prod_{\{x', y\} \in E_g} (e^{-\beta \Psi(x', y, \phi_{x'}, \phi_y)} - 1) \right| \\
& \leq \sup_{x \in \mathbb{Z}^d} \frac{n}{n!} \sum_{\substack{(x_1 = x, \dots, x_n) \in \Lambda^n \\ x_i \neq x_j}} \prod_{i=1}^n \int d\mu(\phi_{x_i}) \left| \sum_{g \in G_n} \prod_{\{i, j\} \in E_g} (e^{-\beta \Psi(x_i, x_j, \phi_{x_i}, \phi_{x_j})} - 1) \right| \\
& \leq \sup_{x \in \mathbb{Z}^d} \frac{n}{n!} \sum_{\substack{(x_1 = x, \dots, x_n) \in \Lambda^n \\ x_i \neq x_j}} \prod_{i=1}^n \int d\mu(\phi_{x_i}) e^{\sum_{i=1}^n \beta J} \sum_{\tau \in T_n} \prod_{\{i, j\} \in \tau} |\beta \Psi(x_i, x_j, \phi_{x_i}, \phi_{x_j})| \\
& \leq \frac{\beta^{n-1} e^{n\beta J}}{(n-1)!} \sup_{x \in \mathbb{Z}^d} \underbrace{\prod_{i=1}^n \int d\mu(\phi_{x_i})}_{(= 1 \text{ não depende mais dos spins})} \sum_{\tau \in T_n} \sum_{\substack{(x_1 = x, \dots, x_n) \in \Lambda^n \\ x_i \neq x_j}} \prod_{\{i, j\} \in \tau} J(x_i, x_j). \quad (4.11)
\end{aligned}$$

Agora, a última soma em (4.11) pode ser realizada da seguinte forma: fixando um vértice da árvore partindo das folhas até a raiz, digamos que fixamos o vértice x_i , realizamos a soma em todos os filhos deste vértice, ou seja, todos os outros vértices que estão ligados a este e temos que o somatório satisfaz

$$\sum_{x_j} J(x_i, x_j) \leq \sup_{x_i \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\substack{y \in \mathbb{Z}^d \\ y \neq x_i}} J(\{x_i, y\}) \leq J.$$

Este processo pode ser realizado para cada vértice da árvore, bem como para qualquer que seja a árvore em T_n . Obtemos assim, a seguinte cota

$$\sum_{\substack{(x_1 = x, \dots, x_n) \in \Lambda^n \\ x_i \neq x_j}} \prod_{\{i, j\} \in \tau} J(x_i, x_j) \leq J^{n-1},$$

para qualquer que seja a árvore τ em T_n . Portanto, a expressão em (4.11) é tal que

$$\begin{aligned}
\sup_{x \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\substack{R \subset \Lambda \\ x \in R: |R|=n}} \left| \prod_{z \in R} \int d\mu(\phi_z) \sum_{g \in G_R} \prod_{\{x', y\} \in E_g} (e^{-\beta \Psi(x', y, \phi_{x'}, \phi_y)} - 1) \right| & \leq \frac{\beta^{n-1} e^{n\beta J} J^{n-1}}{(n-1)!} \sup_{x \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\tau \in T_n} 1 \\
& = \frac{n^{n-2}}{(n-1)!} \beta^{n-1} e^{n\beta J} J^{n-1} \\
& \leq \frac{(\beta J e^{\beta J+1})^n}{\beta J},
\end{aligned}$$

onde usamos a fórmula de Cayley (Teorema 2.2), $\sum_{\tau \in T_n} 1 = n^{n-2}$ e, na última desigualdade, usamos a identidade de Stirling $\frac{n^n}{n!} \leq e^n$. Substituindo na equação (4.7) a cota que obtivemos

acima, ficamos com

$$\sum_{n=2}^{\infty} \frac{(\beta J e^{\beta J+1})^n}{\beta J} e^n \leq 1,$$

ou, equivalentemente,

$$\sum_{n=2}^{\infty} (\beta J e^{\beta J+2})^n \leq \beta J.$$

Usando a soma da série geométrica e resolvendo para β , encontramos que a condição acima é satisfeita se $0 \leq \beta \leq \frac{0.016}{J}$, concluindo a prova do teorema. ■

Capítulo 5

Analiticidade da energia livre do modelo BEG na região desordenada

O modelo Blume-Emery-Griffiths (BEG) é um sistema de spins introduzido em 1970 para explicar algumas das propriedades físicas da mistura ${}^3\text{He} - {}^4\text{He}$ [3] e desde então tem atraído muita atenção e tem sido usado em várias aplicações como fluídos ternários [16, 8], transição de fase em UO_2 [9] e $DyVO_4$ [22] e mudança de fase em microemulsão [17].

O modelo BEG é definido na rede d -dimensional cúbica \mathbb{Z}^d supondo que em cada sítio $x \in \mathbb{Z}^d$ existe uma variável aleatória σ_x (o spin em x) tomando valores no conjunto $\{-1, 0, +1\}$. Para $U \subset \mathbb{Z}^d$, uma configuração de spins σ em U é uma função $\sigma : U \rightarrow \{-1, 0, +1\} : x \mapsto \sigma_x$ e Σ_U denotará o conjunto de todas as configurações de spins em U . Dado um conjunto finito $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ (tipicamente uma caixa cúbica centrada na origem), o Hamiltoniano do sistema em Λ (com condições de fronteira 0 e campo magnético zero) tem a seguinte expressão:

$$\mathcal{H}_\Lambda(\sigma) = - \sum_{\{x,y\} \subset \Lambda} (\sigma_x \sigma_y + X \sigma_x^2 \sigma_y^2) \delta_{|x-y|=1} - 2dX \sum_{x \in \Lambda} \sigma_x^2, \quad (5.1)$$

onde $|\cdot|$ é a norma usual L^1 em \mathbb{Z}^d , $\delta_{|x-y|=1}$ é o símbolo de Kronecker (i.e. $\delta_{|x-y|=1} = 1$ se $|x-y| = 1$ e zero caso contrário) e $X, Y \in \mathbb{R}$.

O espaço de parâmetros XY do modelo é particionado em três regiões distintas (ferromagnética, desordenada, anti-quadrupolar) (veja por exemplo [4]). Focaremos nossa atenção na região desordenada, definida como

$$\mathcal{D} = \{(X, Y) \in \mathbb{R}^2 : X < 0, 1 + 2X + Y < 0\},$$

onde apenas a configuração constante $\sigma_x = 0$, para todo x , é um estado fundamental.

A função de partição do modelo é dada por

$$Z_\Lambda(X, Y, \beta) = \sum_{\sigma \in \Sigma_\Lambda} e^{-\beta \mathcal{H}_\Lambda(\sigma)}. \quad (5.2)$$

Finalmente, a energia livre (de fato, a pressão) no limite termodinâmico é definida como

$$f(X, Y, \beta) = \lim_{\Lambda \uparrow \mathbb{Z}^d} \frac{1}{|\Lambda|} \log Z_\Lambda(X, Y, \beta), \quad (5.3)$$

onde $|\Lambda|$ é a cardinalidade de Λ (este limite é tomado, por exemplo, no sentido de van Hove, neste caso ele está bem definido, é independente da sequência $\Lambda \uparrow \mathbb{Z}^d$ e das condições de fronteira, veja o Teorema 2.3 da Seção 2.1).

Em [13], Lima obteve uma região de parâmetros $\mathcal{U}_{Dob} \subset \mathcal{D}$, onde o critério de Unicidade de Dobrushin é satisfeito para toda temperatura, mostrando a unicidade da medida de Gibbs para toda temperatura. A unicidade da medida de Gibbs assegura a ausência de transição de fase de primeira ordem; entretanto, ela não prevê a possibilidade de ter transições de fase de ordem superior. Uma maneira de assegurar que este não é o caso, seria analisar propriedades de analiticidade da energia livre. Em [15], usando técnicas de expansão em polímeros e em particular expansão em polímeros a altas temperaturas (veja por exemplo [5]), é mostrado que para certa classe de sistemas de spins interagindo via potencial em pares, a energia livre pode ser analítica em qualquer temperatura se algumas condições sobre o potencial são satisfeitas.

Usando o esquema descrito em [15] e a recente identidade grafo árvore, Proposição 2.2, provada em [20] e que discutimos no Capítulo 2, estabelecemos uma região $\mathcal{D}_{analytic} \subset \mathcal{D}$ onde a energia livre do modelo BEG é analítica para toda temperatura. Nosso resultado pode ser resumido pelo seguinte teorema:

Teorema 5.1. *Seja $d \geq 2$ e $\mathcal{D}_{analytic} \subset \mathcal{D}$ a região cuja fronteira é a curva poligonal*

$$X = \begin{cases} -k(Y+1), & \text{se } Y \geq 0 \\ (k-1)Y - k, & \text{se } -1 < Y < 0 \\ \bar{k}(Y-1), & \text{se } Y \leq -1 \end{cases}, \tag{5.4}$$

onde $k = \frac{59.56d-1}{2d}$ e $\bar{k} = \frac{30.52d-1}{2d}$, veja Figura 5.1. Se $(X, Y) \in \mathcal{D}_{analytic}$, então a energia livre do modelo BEG definida em (5.3) é analítica para toda temperatura.

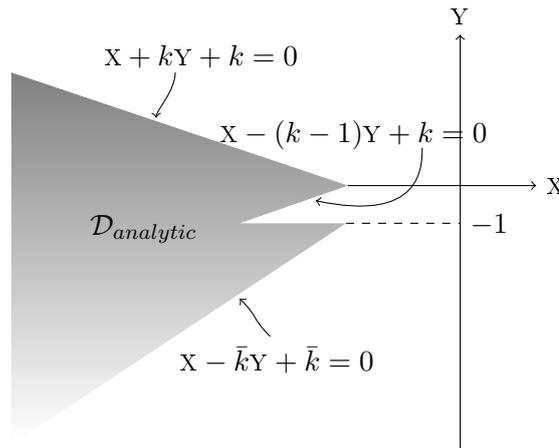


Figura 5.1: A região de analiticidade da energia livre para toda temperatura.

No resto desta seção nos concentramos na prova do Teorema 5.1.

Demonstração: Começamos reescrevendo a função de partição do modelo definida em (5.2) através da expansão em polímeros a altas temperaturas. De (5.1) e (5.2), temos

$$Z_\Lambda(X, Y, \beta) = \sum_{\sigma \in \Sigma_\Lambda} e^{2d\beta X \sum_{x \in \Lambda} \sigma_x^2} e^{\beta \sum_{\{x,y\} \subset \Lambda} (\sigma_x \sigma_y + Y \sigma_x^2 \sigma_y^2) \delta_{|x-y|=1}}. \tag{5.5}$$

Pela expansão de Mayer, a segunda exponencial no lado direito de (5.5) pode ser escrita como

$$\begin{aligned} e^{\beta \sum_{\{x,y\} \subset \Lambda} (\sigma_x \sigma_y + Y \sigma_x^2 \sigma_y^2) \delta_{|x-y|1}} &= \prod_{\{x,y\} \subset \Lambda} [e^{\beta (\sigma_x \sigma_y + Y \sigma_x^2 \sigma_y^2) \delta_{|x-y|1}} - 1 + 1] \\ &= \sum_{g \in \mathcal{G}_\Lambda} \prod_{\{x,y\} \in E_g} (e^{\beta (\sigma_x \sigma_y + Y \sigma_x^2 \sigma_y^2) \delta_{|x-y|1}} - 1), \end{aligned}$$

onde \mathcal{G}_Λ é o conjunto de todos os possíveis grafos (conexos ou não) com conjunto de vértices Λ e dado $g \in \mathcal{G}_\Lambda$, E_g denota seu conjunto de elos. Seja $\Pi_s(\Lambda)$ o conjunto de todas as partições possíveis de Λ em s elementos, $s = 1, 2, \dots, |\Lambda|$, onde $|\Lambda|$ denota o volume de Λ . É uma observação padrão no quadro de técnicas de expansão em polímeros (veja por exemplo [5, 7]),

$$\sum_{g \in \mathcal{G}_\Lambda} (\dots) = \sum_{s=1}^{|\Lambda|} \sum_{\{R_1, \dots, R_s\} \in \Pi_s(\Lambda)} \prod_{l=1}^s \sum_{g \in G_{R_l}} (\dots),$$

onde do lado direito G_{R_l} denota o conjunto de todos os grafos conexos com conjunto de vértices R_l . Assim, temos

$$e^{\beta \sum_{\{x,y\} \subset \Lambda} (\sigma_x \sigma_y + Y \sigma_x^2 \sigma_y^2) \delta_{|x-y|1}} = \sum_{s=1}^{|\Lambda|} \sum_{\{R_1, \dots, R_s\} \in \Pi_s(\Lambda)} \prod_{l=1}^s \sum_{g \in G_{R_l}} \prod_{\{x,y\} \in E_g} (e^{\beta (\sigma_x \sigma_y + Y \sigma_x^2 \sigma_y^2) \delta_{|x-y|1}} - 1),$$

Temos portanto a seguinte representação para a função de partição (5.5)

$$\begin{aligned} Z_\Lambda(X, Y, \beta) &= \sum_{\sigma \in \Sigma_\Lambda} e^{2d\beta X \sum_{x \in \Lambda} \sigma_x^2} \sum_{s=1}^{|\Lambda|} \sum_{\{R_1, \dots, R_s\} \in \Pi_s(\Lambda)} \prod_{l=1}^s \sum_{g \in G_{R_l}} \prod_{\{x,y\} \in E_g} (e^{\beta (\sigma_x \sigma_y + Y \sigma_x^2 \sigma_y^2) \delta_{|x-y|1}} - 1) \\ &= \sum_{\sigma \in \Sigma_\Lambda} \sum_{s=1}^{|\Lambda|} \sum_{\{R_1, \dots, R_s\} \in \Pi_s(\Lambda)} \prod_{l=1}^s e^{2d\beta X \sum_{x \in R_l} \sigma_x^2} \sum_{g \in G_{R_l}} \prod_{\{x,y\} \in E_g} (e^{\beta (\sigma_x \sigma_y + Y \sigma_x^2 \sigma_y^2) \delta_{|x-y|1}} - 1) \\ &= \sum_{s=1}^{|\Lambda|} \sum_{\{R_1, \dots, R_s\} \in \Pi_s(\Lambda)} \left(\sum_{\sigma \in \Sigma_{R_1}} \rho(R_1) e^{2d\beta X \sum_{x \in R_1} \sigma_x^2} \right) \dots \left(\sum_{\sigma \in \Sigma_{R_s}} \rho(R_s) e^{2d\beta X \sum_{x \in R_s} \sigma_x^2} \right), \end{aligned} \tag{5.6}$$

onde

$$\rho(R) = \begin{cases} 1 & \text{se } |R| = 1 \\ \sum_{g \in G_R} \prod_{\{x,y\} \in E_g} (e^{\beta (\sigma_x \sigma_y + Y \sigma_x^2 \sigma_y^2) \delta_{|x-y|1}} - 1) & \text{se } |R| \geq 2 \end{cases}.$$

Definindo

$$\bar{\rho}(R) = \sum_{\sigma \in \Sigma_R} \rho(R) e^{2d\beta X \sum_{x \in R} \sigma_x^2},$$

a função de partição (5.6) pode ser reescrita como

$$Z_\Lambda(X, Y, \beta) = \sum_{s=1}^{|\Lambda|} \sum_{\{R_1, \dots, R_s\} \in \Pi_s(\Lambda)} \bar{\rho}(R_1) \cdots \bar{\rho}(R_s).$$

Note que, se $|R| = 1$ e assim $R = \{x\}$ com $x \in \Lambda$, temos

$$\bar{\rho}(R) = \bar{\rho}(\{x\}) = \sum_{\sigma_x \in \{0, \pm 1\}} e^{2d\beta X \sigma_x^2} = 1 + 2e^{2d\beta X},$$

além disso, para qualquer $g \in G_R$ o fator $\prod_{\{x, y\} \in E_g} (e^{\beta(\sigma_x \sigma_y + Y \sigma_x^2 \sigma_y^2)} - 1)$ é igual a zero sempre que $\sigma_x = 0$ para algum $x \in R$. Então, definindo

$$\bar{\Sigma}_R = \{\sigma \in \Sigma_R : \sigma_x = \pm 1, \forall x \in R\},$$

podemos escrever, para $|R| \geq 2$

$$\bar{\rho}(R) = \sum_{\sigma_R \in \bar{\Sigma}_R} \rho(R) e^{2d\beta X \sum_{x \in R} \sigma_x^2} = \sum_{\sigma_R \in \bar{\Sigma}_R} \rho(R) e^{2d\beta X |R|}. \quad (5.7)$$

Portanto, chamando

$$\xi(R) = \begin{cases} 1, & \text{se } |R| = 1 \\ \left(\frac{e^{2d\beta X}}{1 + 2e^{2d\beta X}} \right)^{|R|} \sum_{\sigma_R \in \bar{\Sigma}_R} \sum_{g \in G_R} \prod_{\{x, y\} \in E_g} (e^{\beta(\sigma_x \sigma_y + Y) \delta_{|x-y|=1}} - 1), & \text{se } |R| \geq 2 \end{cases}, \quad (5.8)$$

podemos reescrever a função de partição como

$$\begin{aligned} Z_\Lambda(X, Y, \beta) &= (1 + 2e^{2d\beta X})^{|\Lambda|} \sum_{s=1}^{|\Lambda|} \sum_{\{R_1, \dots, R_s\} \in \Pi_s(\Lambda)} \xi(R_1) \cdots \xi(R_s) \\ &= (1 + 2e^{2d\beta X})^{|\Lambda|} \left(1 + \sum_{n \geq 1} \sum_{\substack{\{R_1, \dots, R_n\} \subset \Lambda \\ |R_i| \geq 2, R_i \cap R_j = \emptyset}} \xi(R_1) \cdots \xi(R_n) \right) \\ &= (1 + 2e^{2d\beta X})^{|\Lambda|} \left(1 + \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{(R_1, \dots, R_n) \in \Lambda^n \\ |R_i| \geq 2, R_i \cap R_j = \emptyset}} \xi(R_1) \cdots \xi(R_n) \right) \\ &\equiv (1 + 2e^{2d\beta X})^{|\Lambda|} \Xi_\Lambda(X, Y, \beta), \end{aligned}$$

onde $\Xi_\Lambda(X, Y, \beta)$ corresponde à função de partição padrão de um modelo de polímeros abstratos com interação *hard core*, no qual os polímeros R são subconjuntos de \mathbb{Z}^d com cardinalidade maior que 1, atividade $\xi(R)$ e relação de incompatibilidade sendo a interseção não vazia. Portanto, a

energia livre do sistema (no volume finito Λ) é dada por

$$f_\Lambda(X, Y, \beta) = \frac{1}{|\Lambda|} \log Z_\Lambda(X, Y, \beta) = \log(1 + 2e^{2d\beta X}) + P_\Lambda(X, Y, \beta),$$

onde

$$P_\Lambda(X, Y, \beta) = \frac{1}{|\Lambda|} \log \Xi_\Lambda(X, Y, \beta).$$

Como $\log(1 + 2e^{2d\beta x})$ é analítica para todo $\beta \in \mathbb{R}$, é suficiente estudar a analiticidade da pressão $P_\Lambda(X, Y, \beta)$ do gás de polímeros descrita acima como uma função de β para obter informação sobre analiticidade da energia livre no limite termodinâmico. As condições para a convergência absoluta e limitação da pressão de um gás de polímeros abstrato tal como descrito acima têm sido estudadas há muito tempo (veja por exemplo [1] e referências neles). Aplicamos aqui o critério de Fernandez-Procacci (FP) (Teorema 3.4), afirmando que a pressão $P_\Lambda(X, Y, \beta)$ pode ser escrita como uma série que converge absoluta e uniformemente no volume Λ , desde que a condição seguinte seja satisfeita

$$\sum_{n \geq 2} e^{an} \sup_{z \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\substack{R \subset \mathbb{Z}^d: z \in R \\ |R|=n}} |\xi(R)| \leq e^a - 1,$$

onde $\xi(R)$ é definida em (5.8). Escolhendo $a = \log 2$ (que está longe de ser o valor ótimo), esta condição fica

$$\sum_{n \geq 2} 2^n \sup_{z \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\substack{R \subset \mathbb{Z}^d: z \in R \\ |R|=n}} |\xi(R)| \leq 1. \quad (5.9)$$

Fazendo

$$\alpha(X, \beta) = \frac{e^{2d\beta X}}{1 + 2e^{2d\beta X}}, \quad (5.10)$$

temos

$$\sup_{z \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\substack{R \subset \mathbb{Z}^d: z \in R \\ |R|=n}} |\xi(R)| \leq [\alpha(X, \beta)]^n \sup_{z \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\substack{R \subset \mathbb{Z}^d: z \in R \\ |R|=n}} \sum_{\sigma_R \in \bar{\Sigma}_R} \left| \sum_{g \in G_R} \prod_{\{x, y\} \in E_g} (e^{\beta(\sigma_x \sigma_y + Y)\delta_{|x-y|1}} - 1) \right|. \quad (5.11)$$

Agora precisamos de uma cota superior para o fator

$$\left| \sum_{g \in G_R} \prod_{\{x, y\} \in E_g} (e^{-\beta V_{xy}} - 1) \right|, \quad (5.12)$$

onde estamos denotado abreviadamente

$$V_{xy} = -(\sigma_x \sigma_y + Y)\delta_{|x-y|1}. \quad (5.13)$$

Deixe-nos primeiro observar que o potencial em pares V_{xy} definido em (5.13) goza da propriedade de estabilidade (veja Definição 3.2 e [21]) de forma que podemos facilmente provar o seguinte

lema.

Lema 5.1. Para qualquer $R \subset \mathbb{Z}^d$ e qualquer $\sigma \in \Sigma_\Lambda$ é válido que

$$\sum_{\{x,y\} \subset R} V_{xy} \geq -h(Y)|R|, \quad (5.14)$$

onde

$$h(Y) = \begin{cases} d(1+Y) & \text{se } Y > -1 \\ 0 & \text{se } Y \leq -1 \end{cases}. \quad (5.15)$$

Demonstração: Considere primeiro o caso $Y > -1$. Observe que $\sigma_x \sigma_y \geq -1$ e portanto $V_{xy} \geq -(1+Y)\delta_{|x-y|=1}$. Além disso, para cada $R \subset \Lambda$ e $x \in R$ temos que $\sum_{\substack{y \in R \\ y \neq x}} \delta_{|x-y|=1} \leq 2d$. Assim, dado $R \subset \mathbb{Z}^d$ e $\sigma \in \Sigma_R$, podemos cotar

$$\sum_{\{x,y\} \subset R} V_{xy} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{(x,y) \in R^2 \\ x \neq y}} V_{xy} = \frac{1}{2} \sum_{x \in R} \sum_{\substack{y \in R \\ y \neq x}} V_{xy} \geq -\frac{(1+Y)}{2} \sum_{x \in R} \sum_{\substack{y \in R \\ y \neq x}} \delta_{|x-y|=1} \geq -d(1+Y)|R|.$$

O caso $Y \leq -1$ é mais fácil. De fato, quando $Y \leq -1$ temos $V_{xy} \geq 0$ para todo $\sigma \in \Sigma_{\{x,y\}}$ e portanto, para qualquer R e qualquer $\sigma \in \Sigma_R$

$$\sum_{\{x,y\} \subset R} V_{xy} \geq 0.$$

Isto conclui a prova do lema. ■

Voltando agora para o problema de encontrar uma cota superior para (5.12). Uma vez que o potencial em pares V_{xy} é estável (i.e. satisfaz (5.14)), é muito conhecido que estimativas eficientes para fatores da forma (5.12), envolvendo somas sobre grafos conexos, podem ser obtidas via identidades grafo árvores e desigualdades grafo árvores. Aqui usaremos a desigualdade da Proposição 2.2, discutida nas preliminares, que trata-se de uma recente desigualdade grafo árvore devido a Procacci e Yuhjtman (Proposição 1 em [20]). Por esta desigualdade podemos cotar, em nosso presente caso, para qualquer $R \subset \mathbb{Z}^d$ e qualquer $\sigma \in \Sigma_R$,

$$\begin{aligned} \left| \sum_{g \in G_R} \prod_{\{x,y\} \in E_g} (e^{-\beta V_{xy}} - 1) \right| &\leq e^{\beta n h(Y)} \sum_{\tau \in T_R} \prod_{\{x,y\} \in E_\tau} (1 - e^{-\beta |V_{xy}|}) \\ &\leq e^{\beta n h(Y)} \sum_{\tau \in T_R} \prod_{\{x,y\} \in E_\tau} (1 - e^{-\beta(1+|Y|)\delta_{|x-y|=1}}), \end{aligned} \quad (5.16)$$

onde T_R denota o conjunto de todos os grafos árvores com conjunto de vértices R (i.e. grafos conexos sem ciclos) e na última linha usamos que $|V_{xy}| \leq (1+|Y|)\delta_{|x-y|=1}$.

Voltando agora para (5.11), primeiro observe que o lado direito da desigualdade (5.16) não tem dependência nos spins e assim podemos somar livremente do lado direito de (5.11) sobre

todas configurações em $\bar{\Sigma}_R$ ganhando um fator $2^{|R|} = 2^n$. Em segundo lugar, note que

$$1 - e^{-\beta(1+|Y|)\delta_{|x-y|1}} = (1 - e^{-\beta(1+|Y|)})\delta_{|x-y|1},$$

implicando que, para qualquer árvore $\tau \in T_n$,

$$\prod_{\{x,y\} \in E_\tau} (1 - e^{-\beta(1+|Y|)\delta_{|x-y|1}}) = (1 - e^{-\beta(1+|Y|)})^{|R|-1} \prod_{\{x,y\} \in E_\tau} \delta_{|x-y|1}.$$

Estes dois fatos, juntos com (5.16) implicam que (5.11), pode ser reescrita como

$$\sup_{z \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\substack{R \subset \mathbb{Z}^d: z \in R \\ |R|=n}} |\xi(R)| \leq [2\alpha(X, \beta)e^{\beta h(Y)}]^n (1 - e^{-\beta(1+|Y|)})^{n-1} \sup_{z \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\substack{R \subset \mathbb{Z}^d: z \in R \\ |R|=n}} \sum_{\tau \in T_R} \prod_{\{x,y\} \in E_\tau} \delta_{|x-y|1}. \quad (5.17)$$

Defina agora

$$C_n = \sup_{z \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\substack{R \subset \mathbb{Z}^d: z \in R \\ |R|=n}} \sum_{\tau \in T_R} \prod_{\{x,y\} \in E_\tau} \delta_{|x-y|1}$$

e note que

$$\sum_{\substack{R \subset \mathbb{Z}^d: z \in R \\ |R|=n}} \sum_{\tau \in T_R} \prod_{\{x,y\} \in E_\tau} \delta_{|x-y|1} = \frac{1}{(n-1)!} \sum_{\substack{(x_1, \dots, x_n) \in (\mathbb{Z}^d)^n \\ x_i \neq x_j: x_1 = z}} \sum_{\tau \in T_n} \prod_{\{x,y\} \in E_\tau} \delta_{|x-y|1}.$$

Então, sendo T_n o conjunto de todas as árvores com vértices no conjunto $\{1, 2, \dots, n\}$, temos

$$C_n = \frac{1}{(n-1)!} \sup_{z \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\tau \in T_n} \sum_{\substack{(x_1, \dots, x_n) \in (\mathbb{Z}^d)^n \\ x_i \neq x_j: x_1 = z}} \prod_{\{i,j\} \in E_\tau} \delta_{|x_i - x_j|1}.$$

Agora observe que, para qualquer árvore $\tau \in T_n$, vale

$$\sum_{\substack{(x_1, \dots, x_n) \in (\mathbb{Z}^d)^n \\ x_i \neq x_j: x_1 = z}} \prod_{\{i,j\} \in E_\tau} \delta_{|x_i - x_j|1} \leq \left[\sup_{z \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\substack{w \in \mathbb{Z}^d \\ w \neq z}} \delta_{|w-z|1} \right]^{|E_\tau|} = (2d)^{n-1}. \quad (5.18)$$

Desta forma, usando também a fórmula de Cayley (que diz que $\sum_{\tau \in T_n} 1 = n^{n-2}$) podemos cotar C_n superiormente por

$$C_n \leq \frac{n^{n-2}}{(n-1)!} (2d)^{n-1}$$

e assim (5.17) é escrito como

$$\sup_{z \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\substack{R \subset \mathbb{Z}^d: z \in R \\ |R|=n}} |\xi(R)| \leq [2\alpha(X, \beta)e^{\beta h(Y)}]^n \left[2d(1 - e^{-\beta(1+|Y|)}) \right]^{n-1} \frac{n^{n-2}}{(n-1)!}$$

Pela Fórmula de Stirling, temos a desigualdade $\frac{n^{n-2}}{(n-1)!} \leq \frac{e^{n-1}}{n}$ que, usada na expressão acima,

implica que a condição (FP) (5.9) é satisfeita desde que também seja

$$\sum_{n=2}^{\infty} [4\alpha(X, \beta)e^{\beta h(Y)}]^n \frac{e^{n-1}}{n} \left[2d(1 - e^{-\beta(1+|Y|)}) \right]^{n-1} \leq 1,$$

ou

$$4\alpha(X, \beta)e^{\beta h(Y)} \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n} \left[8de\alpha(X, \beta)e^{\beta h(Y)}(1 - e^{-\beta(1+|Y|)}) \right]^{n-1} \leq 1.$$

Sendo $\delta = \alpha(X, \beta)e^{\beta h(Y)}$ e $\epsilon = (1 - e^{-\beta(1+|Y|)})$ e usando o fato que $\sum_{n=2}^{\infty} \frac{r^{n-1}}{n} = \frac{-r - \log(1-r)}{r}$ para $|r| < 1$, a desigualdade acima será satisfeita, desde que

$$4\delta \frac{[-8de\delta\epsilon - \log(1 - 8de\delta\epsilon)]}{8de\delta\epsilon} \leq 1,$$

ou, equivalentemente,

$$4\delta \left[-1 - \log(1 - 8de\delta\epsilon)^{\frac{1}{8de\delta\epsilon}} \right] \leq 1. \quad (5.19)$$

Na última condição assumimos que $\beta > 0$ assim podemos dividir por ϵ ; quando $\beta = 0$, a condição (5.19) é satisfeita trivialmente. Como δ é uma função da constante de estabilidade $h(Y)$ definida em (5.15) que assume dois valores, dependendo de Y , analisaremos os dois casos separadamente.

Começamos analisando (5.19) quando $Y > -1$. Neste caso, $h(Y) = d(1 + Y)$ e portanto $e^{2d\beta X} e^{\beta h(Y)} = e^{\beta d[2X + (1+Y)]}$. Como na região desordenada $1 + 2X + Y < 0$, temos $\delta \leq 1$. Logo, (5.19) vale se

$$-\log(1 - 8de\delta\epsilon)^{\frac{1}{8de\delta\epsilon}} \leq \frac{5}{4}. \quad (5.20)$$

Note que a função $f(x) = -\ln[(1-x)^{1/x}]$ é crescente para $0 < x < 1$ com $\lim_{x \rightarrow 0^+} f(x) = 1$ e $\lim_{x \rightarrow 1^-} f(x) = +\infty$. A solução de $f(x) = 5/4$ é (ligeiramente) maior que 0.37137. E então, a condição (5.20) vale, desde que

$$\delta\epsilon \leq \frac{0.37137}{8de} \leq \frac{1}{58.57d}.$$

Chamando $-d[2X + (1 + Y)] = k_1$, $1 + |Y| = k_2$, e $58.57d = C_+$, a condição acima fica

$$e^{-k_1\beta}(1 - e^{-k_2\beta}) \leq \frac{1}{C_+}.$$

Note que $k_2 \geq 0$ por definição e $k_1 \geq 0$ pois estamos na fase desordenada onde $2X + (1 + Y) < 0$. Observe além disso que o máximo da função $g(\beta) = e^{-k_1\beta}(1 - e^{-k_2\beta})$, como β varia no intervalo $(0, +\infty)$, é atingido em $\beta = \beta_c$ onde β_c é a solução de $e^{-k_2\beta} = \frac{k_1}{k_1 + k_2}$. Então, para qualquer $\beta > 0$, temos

$$g(\beta) \leq \left(e^{-k_2\beta_c} \right)^{\frac{k_1}{k_2}} (1 - e^{-k_2\beta_c}) = \left(\frac{k_1}{k_1 + k_2} \right)^{\frac{k_1}{k_2}} \frac{k_2}{k_1 + k_2} \leq \frac{k_2}{k_1 + k_2},$$

Portanto, se $\frac{k_2}{k_1+k_2} \leq \frac{1}{C_+}$, ou equivalentemente, $k_1 \geq (C_+ - 1)k_2$, a condição para convergência será satisfeita para todo $\beta \geq 0$. Levando em conta a expressão de k_1 e k_2 , temos

$$-d[2x + (1 + Y)] \geq (C_+ - 1)(1 + |Y|),$$

isto é,

$$x \leq -\frac{(C_+ - 1)}{2d}(1 + |Y|) - \frac{1}{2}(1 + Y).$$

Como temos dependência em $|Y|$, temos que considerar os casos $Y \geq 0$ e $-1 < Y < 0$ separadamente (lembrando que estamos ainda considerando o caso $Y > -1$). Para $Y \geq 0$, temos

$$x \leq -\left[\frac{(C_+ - 1)}{2d} + \frac{1}{2}\right](1 + Y)$$

e para $-1 < Y < 0$, temos

$$x \leq -\left[\frac{(C_+ - 1)}{2d} + \frac{1}{2}\right] + \left[\frac{(C_+ - 1)}{2d} - \frac{1}{2}\right]Y.$$

Consideremos agora o caso $Y \leq -1$. Neste caso a constante de estabilidade é $h(Y) = 0$ e assim, relembrando que $\delta = \alpha(X, \beta)e^{\beta h(Y)}$ e que $\alpha(X, \beta) = \frac{e^{2d\beta X}}{1+2e^{2d\beta X}}$ temos que $\delta \leq \frac{1}{3}$. Portanto, a condição (5.19) fica

$$-\log(1 - 8de\delta\epsilon)^{\frac{1}{8de\delta\epsilon}} \leq \frac{7}{4},$$

ou ainda,

$$\delta\epsilon \leq \frac{0.7127}{8de} \leq \frac{1}{30.52d}.$$

Sendo $k_1 = 2d|X|$, $k_2 = 1 - Y$ e $C_- = 30.52d$ e procedendo como no primeiro caso, temos a seguinte condição

$$x \leq -\frac{(C_- - 1)}{2d}(1 - Y).$$

Resumindo, concluímos que a energia livre é analítica para todo β para (X, Y) na porção de \mathcal{D} cuja fronteira é a curva poligonal dada por

$$x = \begin{cases} -k(Y + 1), & \text{se } Y \geq 0 \\ (k - 1)Y - k, & \text{se } -1 < Y < 0 \\ \bar{k}(Y - 1), & \text{se } Y \leq -1 \end{cases},$$

onde $k = \frac{59.57d-1}{2d}$ e $\bar{k} = \frac{30.52d-1}{2d}$, e isto conclui a prova do Teorema 5.1. ■

Referências Bibliográficas

- [1] Bissacot, R.; Fernández, R.; Procacci, A.: *On the convergence of cluster expansions for polymer gases*, Journal of Statistical Physics **139**, 598-617 (2010).
- [2] Bissacot, R.: *Técnicas para convergência da Expansão do Gás de Polímeros e uma aplicação ao Método Probabilístico*. Teses e dissertações pós-graduação em matemática UFMG, 30/11/2009.
- [3] Blume, M.; Emery, V. J.; Griffiths, R. B.: *Ising model for the transition and phase separation in $He^3 - He^4$ mixtures*. Phys. Rev. A **4**, 1071 (1971)
- [4] Braga, G. A., Lima, P. C., O'Carroll, M. L.: *Low temperature properties of the Blume-Emery-Griffiths (BEG) model in the region with an infinite number of ground state configurations*, Reviews of Mathematical Physics, Vol. 12, No. 6, 779-806 (2017).
- [5] Cammarota, C.: *Decay of correlations for Infinite range Interactions in unbounded spin systems*, Comm. Math Phys. **85**, 517–528 (1982).
- [6] Fernandez, R.; Procacci, A.: *Cluster expansion for abstract polymer models. New bounds from an old approach*, Commun. Math. Phys., **274** (2007), 123-140.
- [7] Friedli, S., Velenik, Y.: *Statistical mechanics of lattice systems: a concrete mathematical introduction*, Cambridge University Press (2017).
- [8] Furman, D., Duttagupta, S., Griffiths, R. B.: *Global phase diagram for a three-component model*, Phys. Rev. B, **15**, 441-464 (1977).
- [9] Griffiths, R. B.: *First-order phase transitions in spin-one Ising systems*, Physica, **33**, 689-690 (1967).
- [10] Ising, Ernst.: *Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus*. Zeitschrift für Physik, 31(1),253–258 (1925).
- [11] Kotecký, R.; Preiss, D.: *Cluster expansion for abstract Polymer models*. Comm. Math. Phys. 103, 491-498 (1986).
- [12] Lenz, W.; *Beiträge zum Verständnis der magnetischen Eigenschaften in festen Körpern*. Physikal. Z., 21:613–615, 1920.
- [13] Lima, P. C.: *Uniqueness of the Gibbs state of the BEG model in the disordered region of parameters*, submitted in December 2019.

- [14] Morais, T.: *Gás contínuo de partículas: Cluster expansion nos ensembles canônico e grande canônico*. Teses e dissertações pós-graduação em matemática UFMG, 10/06/2014.
- [15] Morais, T.; Procacci, A.: *Absence of phase transitions in a class of integer spin systems*. J. Statist. Phys. **136**, 677-684 (2009).
- [16] Mukamel, D., Blume, M.: *Ising model for tricritical points in ternary mixtures*, Phys. Rev. A, **10**, 610-617 (1974).
- [17] Schick, M., Shih, W.: *Spin-1 model of a microemulsion*, Phys. Rev. B, **34**, 1797-1801 (1986).
- [18] Peierls, R. E.; *On Ising's ferromagnet model*. Proc. Camb. Phil. Soc., 32:477– 481, 1936.
- [19] Procacci, A.: *Cluster expansion methods in rigorous statistical mechanics*. www.mat.ufmg.br/aldo/papers/book.pdf(2015).
- [20] Procacci, A.; Yuhjtman, S. A.: *Convergence of Mayer and Virial expansions and the Penrose tree-graph identity*, Lett. Math. Phys., **107**, 31-46 (2017).
- [21] Ruelle, D.; (1969): *Statistical mechanics: Rigorous results*. W. A. Benjamin, Inc., New York-Amsterdam.
- [22] Sivardiere, J., Blume, M.: *Dipolar and quadrupolar ordering in $S = 3/2$ Ising systems*, Phys. Rev. B, **5**, 1126-1134 (1972).
- [23] West, D. B.; *Introduction to Graph Theory*. Prentice-Hall, New Jersey, 1996.