

**NOVAS COTAS PARA O RAIO DE
CONVERGÊNCIA DO GÁS DE
POLÍMEROS ABSTRATO**

Thiago Morais Pinto

Orientador : Aldo Procacci

17 de fevereiro de 2009

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICA
PROGRAMA DE MESTRADO EM MATEMÁTICA

Monografia apresentada ao Departamento de Matemática da Universidade Federal de Minas Gerais para obtenção do grau de Mestre em Matemática.

**Dedico este trabalho a minha mãe
Marta e ao meu pai Divino, com
muito carinho e admiração.**

Sumário

1	Identities Algébricas Grafo-Árvore	2
1.1	Definições	2
1.2	Identidade grafo-árvore de Penrose	7
1.2.1	Desigualdade grafo-árvore via Identidade de Penrose	12
1.3	Identidade grafo-árvore de Brydges-Federbush	14
2	O gás de polímeros abstrato	16
2.1	Prelúdio	16
2.2	O caso hard core	22
2.2.1	Reorganização das séries $\Pi_{\gamma_0}^*(\rho)$	26
2.2.2	Árvores e convergência	29
2.2.3	CrITÉRIOS de convergência	32
3	Gás de subconjuntos finitos não-sobrepostos de um conjunto enumerável	38
3.1	Convergência via os critérios dos polímeros abstratos	39
3.2	Exemplo: Modelo BEG	41

Introdução

O gás de polímeros abstrato é um modelo discreto que possui um papel muito importante em muitas situações físicas como sistemas de spins ou teorias de campo discretas.

O gás de polímeros foi primeiramente introduzido por Gruber e Kunz em 1970, eles chamavam de polímeros os subconjuntos finitos de \mathbb{Z}^d também conhecidos por *animals*. Por vários anos, este modelo foi intensamente aplicado em Mecânica Estatística, por exemplo, em expansões de alta e de baixa temperatura.

Em 1986, Kotecký e Preiss propuseram um modelo abstrato em que os polímeros eram objetos quaisquer pertencendo a algum conjunto \mathcal{P} , conjunto dos polímeros, cuja a única estrutura era dada por meio de uma relação simétrica e reflexiva em \mathcal{P} , que eles chamaram de relação de incompatibilidade. Pode-se mostrar que esta relação é equivalente a assumir que a interação entre os polímeros ocorre via um potencial em pares hard-core. Esta generalização proporcionou uma melhoria dos critérios de convergência para a cluster expansions.

Dez anos mais tarde, Dobrushin publicou um artigo com condições de convergência menos restritivas que as anteriores.

Nesta dissertação, baseada quase que integralmente em [3], apresentaremos um novo critério de convergência para a cluster expansion e mostraremos que o mesmo refina aqueles obtidos por Kotecký-Preiss e Dobrushin. A aplicação deste critério a um famoso modelo de spins-um, o Modelo BEG, nos levou a um novo resultado expresso no Teorema 3.1, a saber, a ausência de transição de fase no Modelo BEG para grandes valores de campos de cristal.

Capítulo 1

Identidades Algébricas Grafo-Árvore

1.1 Definições

Denotaremos por $I_n = \{1, 2, \dots, n\}$ e por E_n o conjunto de todos os pares não-ordenados em I_n , isto é, $E_n = \{\{i, j\} : i, j \in I_n \text{ e } i \neq j\}$. Se X é um conjunto tal que $X \subset I_n$, adotaremos a seguinte notação, $E_X = \{\{k, l\} : k, l \in X \text{ e } k \neq l\}$.

Definição 1.1. Uma interação em pares no conjunto I_n é um mapa $V : E_n \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ que associa a todo par $\{i, j\} \in E_n$ um número $V_{ij} \in \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ (convencionando que $i < j$).

Definição 1.2. Sejam V uma interação em pares em I_n e $\{i, j\} \in E_n$. Se $V_{ij} = +\infty$, dizemos que o par $\{i, j\}$ é incompatível e escrevemos $i \not\sim j$. Analogamente, se $V_{ij} < +\infty$, dizemos que $\{i, j\}$ é compatível e denotamos por $i \sim j$.

Um conjunto $X \subset I_n$ é chamado compatível se $i \sim j, \forall i, j \in X$. Caso contrário, o conjunto X será chamado incompatível.

Definição 1.3. Uma interação em pares V é chamada estável, se existe uma função $B : I_n \rightarrow \mathbb{R}_+$ que a cada i associa $B(i) \equiv B_i \geq 0$ tal que, $\forall X \subset I_n$ com $|X| \geq 2$, temos:

$$\sum_{\{j,k\} \in E_X} V_{jk} \geq - \sum_{l \in X} B_l \quad (1.1)$$

onde, $|X|$ denota a cardinalidade do conjunto X .

Note que, se $B = \max_{i \in I_n} B_i$ então uma interação em pares estável é tal que $\forall X \subset I_n$ e $|X| \geq 2$ temos:

$$\sum_{\{j,k\} \subset E_X} V_{jk} \geq -B|X| \quad (1.2)$$

Lema 1.1. *Seja V um potencial em pares estável. Então, $\forall X \subset I_n$ existe no mínimo um $i \in X$ tal que:*

$$W(i, X \setminus \{i\}) \equiv \sum_{\substack{j \in X \\ i \neq j}} V_{ij} \geq -2B_i \geq -2B \quad (1.3)$$

onde $B = \max_{i \in X} B_i$.

Demonstração. Se V é estável, então $\forall X \subset I_n$, temos:

$$\sum_{\{i,j\} \in E_X} V_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{i \in X} \sum_{\substack{j \in X \\ i \neq j}} V_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{i \in X} W(i, X \setminus \{i\}) \geq - \sum_{i \in X} B_i$$

sendo a última desigualdade devido à estabilidade. Isto implica que:

$$\frac{1}{2} \left\{ \sum_{i \in X} [W(i, X \setminus \{i\}) + 2B_i] \right\} \geq 0$$

Portanto, existe pelo menos um $i \in X$ tal que $W(i, X \setminus \{i\}) \geq -2B_i$. \square

Definição 1.4. *Uma interação em pares V é chamada de ultra-estável se existe uma função $B : I_n \rightarrow \mathbb{R}_+$ que a cada $i \in I_n$ associa um valor $B_i \geq 0$ tal que, para todo conjunto compatível $X \subset I_n$ com $|X| \geq 2$, temos:*

$$\sum_{j \in X \setminus \{i\}} V_{ij} \geq -2B_i \geq -2B \quad (1.4)$$

novamente com $B = \max_{i \in I_n} B_i$.

Observe que se i é incompatível com algum $j \in X$, a desigualdade acima é trivialmente satisfeita e portanto podemos nos restringir a pares $\{i, j\}$ tais que $i \sim j, \forall j \in X$.

É importante salientar que a ultraestabilidade implica estabilidade. Para demonstrar este fato, suponha que $V : E_n \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ obedeça às condições da Definição 1.4 e considere $Y \subset I_n$ um conjunto compatível, então para qualquer $i \in Y$, temos:

$$\sum_{j \in Y \setminus \{i\}} V_{ij} \geq -2B_i$$

e deste modo,

$$\sum_{\{i,j\} \in E_Y} V_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{i \in Y} \sum_{j \in Y \setminus \{i\}} V_{ij} \geq -2 \sum_{i \in Y} B_i$$

A recíproca é falsa, existem potenciais estáveis que não são ultra-estáveis. Por exemplo, o potencial de Lennard-Jones.

Definição 1.5. Uma interação em pares V em I_n é chamado de limitada se $\forall \{i, j\} \in E_n$ temos:

$$V_{ij} < +\infty$$

Definição 1.6. Dada uma interação em pares V em I_n , chamamos de potencial originado por V à função $U : P(I_n) \longrightarrow \mathbb{R}$ tal que $\forall X \subset I_n$ associa o valor:

$$U(X) = \begin{cases} \sum_{\{i,j\} \in E_X} V_{ij}, & \text{se } |X| \geq 2 \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

onde, $P(I_n)$ é o conjunto das partes de I_n .

Definição 1.7. O fator de Gibbs do potencial U é a função:

$$\begin{aligned} e^{-U} : E_X &\longrightarrow \mathbb{R} \\ X &\longmapsto e^{-U(X)} = \prod_{\{i,j\} \in E_X} e^{-V_{ij}} \end{aligned}$$

Definição 1.8. Um grafo g é um par $g = (V_g, E_g)$, onde V_g é um conjunto enumerável e $E_g = \{\{i, j\} : i, j \in V_g \text{ e } i \neq j\}$. O conjunto V_g é chamado de conjunto de vértices de g e E_g , o conjunto de elos do grafo g . Dizemos também que $f = (V_f, E_f)$ é um subgrafo de $g = (V_g, E_g)$, se $V_f \subset V_g$ e $E_f \subset E_g$.

Definição 1.9. Dizemos que um grafo $g = (V_g, E_g)$ é conexo, se a cada par B, C de subconjuntos de V_g com a propriedade que $B \cup C = V_g$ e $B \cap C = \emptyset$, existir um $e \in E_g$ tal que $e \cap B \neq \emptyset$ e $e \cap C \neq \emptyset$.

Definição 1.10. Dado um grafo $g = (V_g, E_g)$, chamamos de componentes conexas de g , o conjunto dos seus subgrafos conexos disjuntos.

Definição 1.11. Um grafo $\tau = (V_\tau, E_\tau)$ tal que $|E_\tau| = |V_\tau| - 1$ é chamado grafo árvore, ou simplesmente, árvore.

Observe que uma árvore será sempre um grafo conexo.

O fator de Gibbs pode reescrito em termos de grafos da seguinte maneira:

Dado um conjunto $X \subset I_n$, escrevemos:

$$e^{-U(X)} = \prod_{\{i,j\} \in E_X} (e^{-V_{ij}}) = \prod_{\{i,j\} \in E_X} [1 + (e^{-V_{ij}} - 1)]$$

Expandindo este último termo, obtemos:

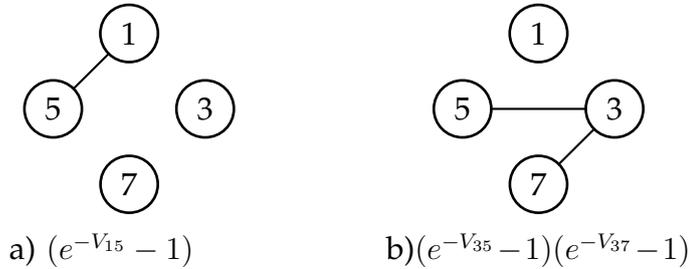
$$\begin{aligned}
& 1 + \sum_{\substack{\{i_1, i_2\} \in E_X \\ i_1 < i_2}} (e^{-V_{i_1 i_2}} - 1) + \\
& \sum_{\substack{\{i_1, i_2\} \in E_X \\ i_1 < i_2}} \sum_{\substack{\{i_3, i_4\} \in E_X \\ i_3 < i_4}} (e^{-V_{i_1 i_2}} - 1)(e^{-V_{i_3 i_4}} - 1) + \dots + \\
& \sum_{\substack{\{i_1, i_2\} \in E_X \\ i_1 < i_2}} \dots \sum_{\substack{\{i_{k-1}, i_k\} \in E_X \\ i_{k-1} < i_k}} (e^{-V_{i_1 i_2}} - 1)(e^{-V_{i_3 i_4}} - 1) \dots (e^{-V_{i_{k-1} i_k}} - 1)
\end{aligned}$$

Note que, não podemos obter termos da forma $[e^{-V_{kl}} - 1]^2$, pois $U(X) = \sum_{\{k,l\} \in E_X: k < l} V_{kl}$ leva em conta cada par apenas uma vez.

Cada parcela desta expansão pode ser vista como grafos nos pontos de X , do seguinte modo:

As parcelas de $\sum_{\substack{\{i,j\} \in E_X \\ i_1 < i_2}} (e^{-V_{i_1 i_2}} - 1)$ são representadas por grafos com vértices em X com apenas um elo ligando os pares $\{i_1 i_2\}$. Analogamente, as parcelas de $\sum_{\substack{\{i_1, i_2\} \in E_X \\ i_1 < i_2}} \sum_{\substack{\{i_3, i_4\} \in E_X \\ i_3 < i_4}} (e^{-V_{i_1 i_2}} - 1)(e^{-V_{i_3 i_4}} - 1)$ são representadas por grafos com vértices em X contendo dois elos ligando os pares $\{i_1 i_2\}$ e $\{i_3 i_4\}$ e, assim por diante.

Por exemplo, se $X = \{1, 3, 5, 7\} \subset I_7$, teremos:



A última parcela da expansão é aquela em que todos os possíveis pares “ordenados” em X estão presentes será representada pelo grafo completo, ou seja, aquele que possui todos os possíveis elos.

Convencionamos que o número 1 representa o grafo vazio, ou seja, o grafo cujo o conjunto de elos é vazio.

Deste modo,

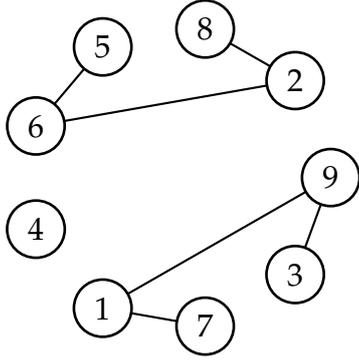
$$\prod_{\{i,j\} \in E_X} (e^{-V_{ij}} - 1) = \sum_{g \in \mathcal{G}_X} \prod_{\{i,j\} \in E_g} (e^{-V_{ij}} - 1) \quad (1.5)$$

onde \mathcal{G}_X é o conjunto de todos os grafos (conexos ou não-conexos) em X .

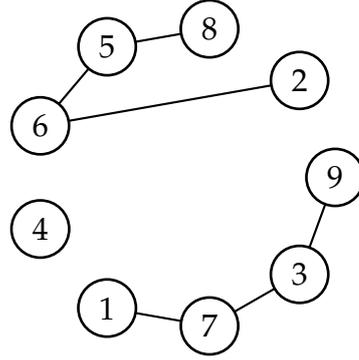
Podemos reorganizar a soma acima apenas sobre os grafos conexos de X .

Para tanto, note que cada grafo $g \in \mathcal{G}_X$ induz naturalmente uma partição no conjunto X , a saber, aquela dada pelas componentes conexas de g . Análogamente, a cada partição do conjunto X está associado um grafo $g' \in \mathcal{G}_X$ cujas componentes conexas correspondem aos átomos da partição dada. No entanto, podemos ter vários grafos diferentes associados a mesma partição.

Por exemplo:



Um grafo $g \in \mathcal{G}_{I_9}$, cujas as componentes conexas são $\{1, 3, 7, 9\}$, $\{2, 5, 6, 8\}$ e $\{4\}$



Outro grafo $g' \in \mathcal{G}_{I_9}$, cujas as componentes conexas são $\{1, 3, 7, 9\}$, $\{2, 5, 6, 8\}$ e $\{4\}$

Para $1 \leq k \leq |X|$, vamos denotar por $\{P_1, P_2, \dots, P_k\}$ uma partição do conjunto X , ou seja, para cada $i, j = 1, 2, \dots, k$ temos; $P_i \neq \emptyset, P_i \cap P_j = \emptyset$ e $\cup_{j=1}^k P_j = X$, e por Π_X o conjunto de todas partições de X e $\mathcal{C}(g)$ as componentes conexas do grafo g .

Então,

$$\sum_{g \in \mathcal{G}_X} \prod_{\{i,j\} \in E_g} (e^{-V_{ij}} - 1) = \sum_{g \in \mathcal{G}_X} \prod_{\mathcal{C}(g)} \prod_{g' \in E_{\mathcal{C}(g)}} (e^{-V_{ij}} - 1)$$

Como a cada $g \in \mathcal{G}_X$, está associado uma partição $\{P_1, P_2, \dots, P_k\}$ com $1 \leq k \leq |X|$ temos:

$$\sum_{g \in \mathcal{G}_X} \prod_{\mathcal{C}(g)} \prod_{g' \in E_{\mathcal{C}(g)}} (e^{-V_{ij}} - 1) = \sum_{k=1}^{|X|} \sum_{\{P_1, P_2, \dots, P_k\}} \prod_{i=1}^k \phi^T(P_i)$$

onde

$$\phi^T(P_i) = \begin{cases} \sum_{g' \in \mathcal{G}_{P_i}} \prod_{\{i,j\} \in E_{g'}} (e^{-V_{ij}} - 1), & \text{se } |P_i| \geq 2 \\ 1, & \text{se } |P_i| = 1 \end{cases}$$

e G_{P_i} é o conjunto de todos os grafos conexos com vértices em P_i .

Logo, o fator de Gibbs pode ser escrito como:

$$e^{-U(X)} = \sum_{k=1}^{|X|} \sum_{\{P_1, P_2, \dots, P_k\} \in \Pi_X} \prod_{i=1}^k \phi^T(P_i)$$

A partir de agora, vamos procurar expressões para $\phi^T(X)$ em termos de árvores ao invés de grafos conexos gerais.

1.2 Identidade grafo-árvore de Penrose

Esta identidade será obtida construindo-se um mapa entre G_n (conjunto de todos os grafos conexos com vértices em $\{1, 2, \dots, n\}$) e T_n (o conjunto de todas as árvores em $\{1, 2, \dots, n\}$).

Para definir este mapa, escolhamos um dos vértices no conjunto $\{1, 2, \dots, n\}$ para ser a raiz i_0 da futura árvore (por simplicidade pensaremos sempre que $i_0 = 1$).

Escolhida a raiz 1, para todo $g \in G_n$ denotamos por $d_g(i)$, a distância em g da raiz ao vértice i , definida como o número de elos do menor caminho ligando a raiz ao vértice i .

A árvore $m(g)$ é associada ao grafo g de acordo com as regras definidas a seguir:

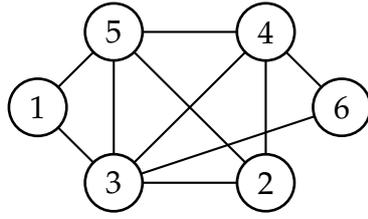
(m.1) Deletamos todos os elos $\{i, j\} \in E_g$ com $d_g(i) = d_g(j)$.

Obtemos um novo grafo g' que ainda é conexo (existe no mínimo um caminho ligando todos os vértices, a saber, aquele passando pela raiz), $d_{g'}(i) = d_g(i) \forall i$ e cada elo $\{i, j\} \in E_{g'}$ é tal que $|d_{g'}(i) - d_{g'}(j)| = 1$.

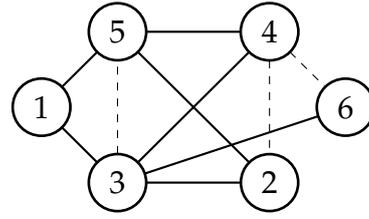
(m.2) Para qualquer $i \neq i_0$ (raiz), deletamos de g' todos os elos $\{i, j\} \in E_{g'}$ tais que $d_{g'}(j) = d_{g'}(i) - 1$, exceto aquele com menor índice j .

Demos origem a um grafo $g'' = m(g) \subset g$ que é conexo por construção e tal que $m(g) \subset g$ não contém ciclos, isto é, $m(g)$ é uma árvore e $m(g) \in T_n$.

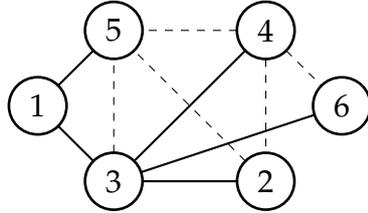
Vejamos um exemplo:



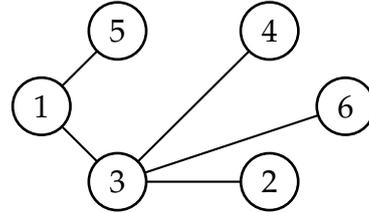
a) grafo inicial : g



b) passo (m.1) = g'



c) passo (m.2) = g''



d) $m(g) = g''$

Definimos também um mapa $p : T_n \rightarrow G_n$ que associa a cada árvore $\tau \in T_n$ um grafo maximal, $p(\tau)$, no sentido que se $g \in G_n$ é tal que $m(g) = \tau$, então $g \subset p(\tau)$.

Como antes, $\tau \in T_n$ é entendida como uma árvore cuja raiz é 1, isto é, $i_0 = 1$.

O conjunto das árvores com raiz cujos vértices são indexados por $\{1, \dots, n\}$ admite uma ordem parcial natural, denotada por \prec , definida como se segue:

Dados dois vértices distintos i e j , dizemos que j é um *descendente* de i ou i é um *ancestral* de j , e escrevemos $i \prec j$, se existe um caminho da raiz i_0 ao vértice j contendo i .

Se $\{i, j\}$ é um elo de uma árvore τ com vértices no conjunto $\{1, 2, \dots, n\}$, então ou $i \prec j$ ou $j \prec i$. Deste modo, todo elo $\{i, j\}$ em uma árvore com índices é dirigido (isto é, é um par ordenado) e escrevemos (i, j) se $i \prec j$. Seja um elo dirigido (i, j) em uma árvore com raiz τ , então i é chamado de *pai* (ou predecessor) de j e j é chamado de *filho* (ou descendente) de i .

Dado um vértice $i \neq i_0$ em uma árvore com raiz τ , o *número de geração do vértice i em τ* , denotado por $d_\tau(i)$, é o número de elos no único caminho da raiz i_0 ao vértice i .

Observe que todo vértice $i \neq i_0$ em τ possui um único pai, que denotaremos por i' , e s_i descendentes, i^1, i^2, \dots, i^{s_i} . Se $s_i = 0$ dizemos que i é uma extremidade ou uma folha de τ . Vértices de τ com mesmo pai são chamados *irmãos*.

Novamente, os filhos de um vértice i podem ser ordenados de acordo com a ordem de suas etiquetas ("idades"), assim uma ordenação de i^1, i^2, \dots, i^{s_i} seria $i^1 < i^2 < \dots < i^{s_i}$.

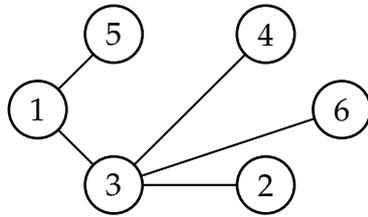
De agora em diante, assumiremos que as árvores com raiz tratadas aqui são ordenadas, no sentido que os filhos dos seus vértices são ordenados de acordo com a ordem de suas etiquetas.

O mapa p associa a cada árvore $\tau \in T_n$ um grafo maximal (no sentido discutido anteriormente), $p(\tau)$, adicionando todos os elos $\{i, j\}$ tais que:

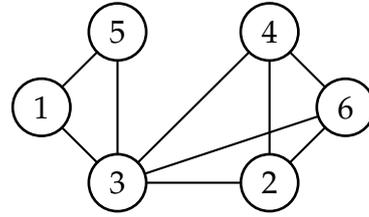
(p.1) $d_\tau(i) = d_\tau(j)$, ligamos os vértices da mesma geração.

(p.2) $d_\tau(j) = d_\tau(i) - 1$ e $j > i'$, ligamos i aos vértices j da geração anterior com índice maior que i' (pai de i).

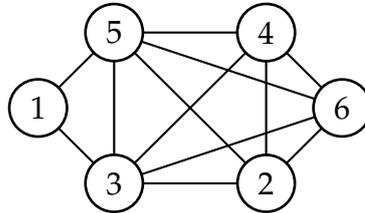
Vejamos um exemplo :



a) árvore inicial : τ



b) passo (p.1) : τ'



c) passo (p.2) : $\tau'' = p(\tau)$

A identidade de Penrose afirma que:

Teorema 1.1. Para qualquer $\{V_{ij}\}_{1 \leq i < j \leq n}$ com $V_{ij} \in \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$. Vale a seguinte igualdade:

$$\sum_{g \in G_n} \prod_{\{i,j\} \in E_g} (e^{-V_{ij}} - 1) = \sum_{\substack{\tau \in T_n \\ (p(\tau) \setminus E_\tau) \cap E_n^\infty = \emptyset}} \exp \left\{ - \sum_{\{i,j\} \in E_{p(\tau)} \setminus E_\tau} V_{ij} \right\} \prod_{\{k,l\} \in E_\tau} (e^{-V_{kl}} - 1)$$

onde $E_n^\infty = \{\{i, j\} \in E_n : i \infty j\}$.

Demonstração. Observe que : $\sum_{g \in G_n} = \sum_{\tau \in T_n} \sum_{\substack{g \in G_n \\ m(g)=\tau}}$.

Podemos tornar mais clara a igualdade acima definindo uma relação de equivalência, \cong , entre os grafos g de G_n , a saber:

$$g_1 \cong g_2 \iff m(g_1) = \tau = m(g_2)$$

e denotando $G_\tau = \{g \in G_n : m(g) = \tau\}$ obtemos, $\cup_{g \in G_n} = \cup_{\tau \in T_n} \cup_{\substack{g \in G_n \\ m(g)=\tau}}$.

Note também que $\forall g \in G_n$, temos $\tau \subseteq g \subseteq p(\tau)$.

Daí,

$$\begin{aligned} \sum_{g \in G_n} \prod_{\{i,j\} \in E_g} (e^{-V_{ij}} - 1) &= \sum_{\tau \in T_n} \sum_{\substack{g \in G_n \\ m(g)=\tau}} \prod_{\{i,j\} \in E_g} (e^{-V_{ij}} - 1) = \\ &= \sum_{\tau \in T_n} \prod_{\{i,j\} \in E_\tau} (e^{-V_{ij}} - 1) \sum_{\substack{g \in G_n \\ m(g)=\tau}} \prod_{\{k,l\} \in E_g \setminus E_\tau} (e^{-V_{kl}} - 1) \end{aligned} \quad (1.6)$$

Pela observação anterior, o último somatório acima vai de τ à $p(\tau)$.

Como visto anteriormente, equação (1.5), temos:

$$\sum_{\substack{g \in G_n \\ m(g)=\tau}} \prod_{\{k,l\} \in E_g \setminus E_\tau} (e^{-V_{kl}} - 1) = \prod_{\{k,l\} \in E_{p(\tau)} \setminus E_\tau} [1 + (e^{-V_{kl}} - 1)] \quad (1.7)$$

Substituindo isto em (1.6), teremos:

$$\begin{aligned} &\sum_{\tau \in T_n} \prod_{\{i,j\} \in E_\tau} (e^{-V_{ij}} - 1) \prod_{\{k,l\} \in E_{p(\tau)} \setminus E_\tau} e^{-V_{kl}} = \\ &= \sum_{\tau \in T_n} \exp \left\{ - \sum_{\{k,l\} \in E_{p(\tau)} \setminus E_\tau} V_{kl} \right\} \prod_{\{i,j\} \in E_\tau} (e^{-V_{ij}} - 1) = \\ &= \sum_{\substack{\tau \in T_n \\ [E_{p(\tau)} \setminus E_\tau] \cap E_n^\infty = \emptyset}} \exp \left\{ - \sum_{\{k,l\} \in E_{p(\tau)} \setminus E_\tau} V_{kl} \right\} \prod_{\{i,j\} \in E_\tau} (e^{-V_{ij}} - 1) \end{aligned}$$

Pois quando $[E_{p(\tau)} \setminus E_\tau] \cap E_n^\infty \neq \emptyset$, existe um elo $\{i, j\} \in E_{p(\tau)} \setminus E_\tau$ tal que $i \approx j$, de modo que $\exp \left\{ - \sum_{\{k,l\} \in E_{p(\tau)} \setminus E_\tau} V_{k,l} \right\}$ é nulo. □

Para ilustrar o uso da identidade de Penrose, vamos aplicá-la ao potencial definido abaixo:

Definição 1.12. Uma interação em pares $V : E_n \longrightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ é chamada de *hard core se, e somente se,*

$$V(E_n) = \{0, +\infty\}$$

Definição 1.13. Seja $\{V_{ij}\}_{1 \leq i < j \leq n}$ uma interação em pares *hard core*. Definimos o grafo g_V como aquele com vértices em $\{1, 2, \dots, n\}$ e conjunto de elos $E_{g_V} = \{\{i, j\} \in E_n : V_{ij} = +\infty\}$.

Definição 1.14. Dada uma interação em pares *hard core* $\{V_{ij}\}_{1 \leq i < j \leq n}$, definimos o conjunto de árvores de Penrose em I_n como um subconjunto $P_n^{g_V} \subset T_n$ de maneira que se $\tau \in P_n^{g_V}$, então as seguintes condições são satisfeitas:

t.0) se $\{i, j\} \in E_\tau$, então $i \asymp j$, ou seja, $\{i, j\} \in E_{g_V}$

t.1) se i e j são dois vértices tais que $d(i) = d(j)$, então $i \sim j$ e $\{i, j\} \notin E_{g_V}$.

t.2) se dois vértices são tais que $d(j) = d(i) - 1$ e $j > i'$ (pai de i), então $\{i, j\} \notin E_{g_V} \iff i \sim j$.

(Os “tios” de “idade” maior que o pai de i , são compatíveis com i).

Temos o seguinte:

Corolário 1.1. Para toda interação em pares *hard core* $\{V_{ij}\}_{1 \leq i < j \leq n}$, temos a seguinte identidade:

$$\sum_{g \in G_n} \prod_{\{i, j\} \in E_g} (e^{-V_{ij}} - 1) = \sum_{\substack{g \in G_n \\ g \subset g_V}} (-1)^{|E_g|} = (-1)^{n-1} \sum_{\tau \in P_n^{g_V}} 1$$

Demonstração. Observe que $(e^{-V_{ij}} - 1) = 0$ sempre que $i \sim j$, ou seja, $\{i, j\} \notin E_{g_V}$ e podemos somar apenas sobre os grafos g 's tais que $g \subset g_V$. Se g_V não é conexo então qualquer fator na soma sobre os grafos conexos g conterá no mínimo um elo $\{i, j\} \in E_g$ tal que $\{i, j\} \notin E_{g_V}$, assim se g_V não é conexo, temos:

$$\sum_{\substack{g \in G_n \\ g \subset g_V}} \prod_{\{i, j\} \in E_g} (e^{-V_{ij}} - 1) = 0$$

Se g_V é conexo, consideramos novamente o mapa p que associa a cada árvore $\tau \subset g_V$ o grafo maximal $p(\tau)$ dentre aqueles tais que $m(g) = \tau$.

$$\begin{aligned}
& \sum_{g \in G_n} \prod_{\{i,j\} \in E_g} e^{-V_{ij}} - 1 = \sum_{\substack{g \in G_n \\ g \subset g_V}} (-1)^{|E_g|} = \\
& = \sum_{\tau \in T_n} (-1)^{|E_\tau|} \sum_{\substack{g \in G_n \\ m(g) = \tau}} (-1)^{|E_g| - |E_\tau|} = \\
& = (-1)^{n-1} \sum_{\tau \in T_n} \sum_{\substack{g \in G_n \\ m(g) = \tau}} \prod_{\{k,l\} \in E_g \setminus E_\tau} (-1) =; \text{ usando (1.7)} \\
& = (-1)^{n-1} \sum_{\substack{\tau \in T_n \\ \tau \subset g_V}} [1 + (-1)]^{|E_{p(\tau)}| - |E_\tau|} = \\
& = (-1)^{n-1} \sum_{\substack{\tau \in T_n \\ \tau \subset g_V \\ p(\tau) = \tau}} 1
\end{aligned}$$

A condição $\tau \subset g_V$ é equivalente a **t.0**) e $p(\tau) = \tau$ ocorre se, e somente se, **t.1**) e **t.2**) são satisfeitas. \square

1.2.1 Desigualdade grafo-árvore via Identidade de Penrose

Para os potenciais ultra-estáveis a identidade de Penrose produz a seguinte cota:

Corolário 1.2. *Seja V um potencial em pares ultra-estável em I_n . Então vale a seguinte desigualdade:*

$$\left| \sum_{g \in G_n} \prod_{\{i,j\} \in E_g} e^{-V_{ij}} - 1 \right| \leq e^{\sum_{i=1}^n 2B_i} \sum_{\tau \in T_n} \prod_{\{i,j\} \in E_\tau} |e^{-|V_{ij}|} - 1| \prod_{i=1}^n \left[\prod_{1 \leq j < k \leq s_i} \mathbb{1}_{\{ij \sim ik\}} \right] \quad (1.8)$$

Demonstração. Usando a identidade de Penrose temos:

$$\left| \sum_{g \in G_n} \prod_{\{i,j\} \in E_g} e^{-V_{ij}} - 1 \right| \leq \sum_{\tau \in T_n} \exp \left\{ - \sum_{\{i,j\} \in E_{p(\tau)} \setminus E_\tau} V_{ij} \right\} \prod_{\{k,l\} \in E_\tau} |e^{-V_{kl}} - 1|$$

Para qualquer árvore τ , definimos $E_\tau^+ = \{\{i, j\} \in E_\tau : V_{ij} < 0\}$. De modo que:

$$\begin{aligned}
& \left| \sum_{g \in G_n} \prod_{\{i, j\} \in E_g} e^{-V_{ij}} - 1 \right| \leq \\
& \leq \sum_{\tau \in T_n} \exp \left\{ - \sum_{\{i, j\} \in [E_{p(\tau)} \setminus E_\tau] \cup E_\tau^+} V_{ij} \right\} \prod_{\{k, l\} \in E_\tau \setminus E_\tau^+} |e^{-V_{kl}} - 1| \prod_{\{k, l\} \in E_\tau^+} \frac{|e^{-V_{kl}} - 1|}{e^{-V_{kl}}} \\
& = \sum_{\tau \in T_n} \exp \left\{ - \sum_{\{i, j\} \in [E_{p(\tau)} \setminus E_\tau] \cup E_\tau^+} V_{ij} \right\} \prod_{\{k, l\} \in E_\tau \setminus E_\tau^+} |e^{-V_{kl}} - 1| \prod_{\{k, l\} \in E_\tau^+} \frac{e^{-V_{kl}} - 1}{e^{-V_{kl}}} \\
& = \sum_{\tau \in T_n} \exp \left\{ - \sum_{\{i, j\} \in [E_{p(\tau)} \setminus E_\tau] \cup E_\tau^+} V_{ij} \right\} \prod_{\{k, l\} \in E_\tau \setminus E_\tau^+} |e^{-V_{kl}} - 1| \prod_{\{k, l\} \in E_\tau^+} (1 - e^{V_{kl}}) \\
& = \sum_{\tau \in T_n} \exp \left\{ - \sum_{\{i, j\} \in [E_{p(\tau)} \setminus E_\tau] \cup E_\tau^+} V_{ij} \right\} \prod_{\{k, l\} \in E_\tau} |e^{-|V_{kl}|} - 1|
\end{aligned}$$

A fim de reescrever o fator $\exp \left\{ - \sum_{\{i, j\} \in [E_{p(\tau)} \setminus E_\tau] \cup E_\tau^+} V_{ij} \right\}$ de maneira diferente, para cada vértice $i \in \tau$ defina um conjunto de vértices S_i conectado a i através de um elo e tais que:

- $\{i, j\} \in [E_{p(\tau)} \setminus E_\tau] \cup E_\tau^+$;
- ou $d_\tau(j) = d_\tau(i) + 1$, ou $d_\tau(j) = d_\tau(i)$ e $j > i$.

S_i pode ser vazio, por exemplo, para aqueles vértices i da árvore em que $d(i)$ é maximal e todos os j 's com $d(j) = d(i)$ são tais que $j < i$. Por construção, $i \notin S_i$.

Definindo $W(i; S_i) = \sum_{j \in S_i} V_{ij}$, então:

$$\sum_{\{i, j\} \in [E_{p(\tau)} \setminus E_\tau] \cup E_\tau^+} V_{ij} = \sum_{i=1}^n W(i; S_i).$$

Note agora que $e^{-\sum_{i=1}^n W(i; S_i)}$ é zero sempre quando existe um par $\{i, j\} \in [E_{p(\tau)} \setminus E_\tau]$ com $i \approx j$ (todos os elos $\{i, j\} \in E_\tau^+$ são tais que $i \sim j$ por definição).

Daí,

$$e^{\sum_{i=1}^n W(i; S_i)} = e^{-\sum_{i=1}^n W(i; S_i)} \prod_{\{i, j\} \in [E_{p(\tau)} \setminus E_\tau] \cup E_\tau^+} \mathbb{1}_{\{i \sim j\}}$$

Assim o fator $e^{\sum_{i=1}^n W(i; S_i)}$ é diferente de zero somente quando $\{i\} \cup S_i$ é compatível e usando a condição de ultraestabilidade de V , temos:

$$W(i; S_i) \geq -2B_i$$

e

$$e^{\sum_{i=1}^n W(i;S_i)} \leq e^{\sum_{i=1}^n 2B_i} \prod_{\{i,j\} \in [E_{p(\tau)} \setminus E_\tau] \cup E_\tau^+} \mathbb{1}_{\{i \sim j\}}$$

O produtório acima ainda admite a seguinte cota:

$$\prod_{\{i,j\} \in [E_{p(\tau)} \setminus E_\tau] \cup E_\tau^+} \mathbb{1}_{\{i \sim j\}} \leq \prod_{i=1}^n \left[\prod_{1 \leq j < k \leq s_i} \mathbb{1}_{\{ij \sim ik\}} \right]$$

O lado esquerdo da desigualdade acima é menos restritivo que o direito, pois aquele só requer compatibilidade entre “primos” enquanto este entre todos os i e j tais que $\{i, j\} \in [E_{p(\tau)} \setminus E_\tau] \cup E_\tau^+$.

Juntando todas as cotas obtemos:

$$\left| \sum_{g \in G_n} \prod_{\{i,j\} \in E_g} e^{-V_{ij}} - 1 \right| \leq e^{\sum_{i=1}^n 2B_i} \sum_{\tau \in T_n} \prod_{\{i,j\} \in E_\tau} |e^{-|V_{ij}|} - 1| \prod_{i=1}^n \left[\prod_{1 \leq j < k \leq s_i} \mathbb{1}_{\{ij \sim ik\}} \right]$$

□

1.3 Identidade grafo-árvore de Brydges-Federbush

Por razões de completeza, vamos enunciar uma outra identidade grafo-árvore e um de seus corolários que será útil posteriormente, as demonstrações se encontram em [2].

Teorema 1.2. *Seja V um potencial em pares limitado em I_n , isto é, (tal que $V_{ij} < +\infty$ para todo $\{i, j\} \in E_n$). Então os coeficientes de Ursell $\phi_n^T = \phi_n^T(I_n)$ satisfazem a seguinte identidade:*

$$\begin{aligned} \phi_n^T(I_n) &= \sum_{g \in G_n} \prod_{\{i,j\} \in E_g} (e^{-V_{ij}} - 1) = \\ &= \sum_{\tau \in T_n} \prod_{\{i,j\} \in E_\tau} (-V_{ij}) \int e^{-\sum_{1 \leq i < j \leq n} \mathbf{t}_n(i,j) V_{ij}} d\mu_\tau(\mathbf{t}_n, \mathbf{X}_n) \end{aligned} \quad (1.9)$$

onde

- \mathbf{t}_n denota um conjunto de $n - 1$ parâmetros interpolantes $\mathbf{t}_n \equiv (t_1, t_2, \dots, t_{n-1}) \in [0, 1]^{n-1}$,
- o símbolo \mathbf{X}_n denota um conjunto de seqüências "crescentes" de $n - 1$ subconjuntos, $\mathbf{X}_n \equiv X_1, \dots, X_{n-1}$ tais que $\forall i, X_i \subset \{1, 2, \dots, n\}$, nós devemos ter $X_i \subset X_{n-1}, |X_i| = i$ e $X_1 = \{1\}$
- o fator $\mathbf{t}_n(\{i, j\})$, depende de \mathbf{X}_n , é definido como:

$$\mathbf{t}_n(\{i, j\}) = t_1(\{i, j\})t_2(\{i, j\}) \cdots t_{n-1}(\{i, j\})$$

com

$$t_l(\{i, j\}) = \begin{cases} t_l \in [0, 1], & \text{se } i \in X_l \text{ e } j \notin X_l \text{ ou vice-versa} \\ 1, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

- a medida

$$\int d\mu_\tau(\mathbf{t}_n, \mathbf{X}_n) = \int_0^1 dt_1 \cdots \int_0^1 dt_{n-1} \sum_{\substack{\mathbf{X}_n \\ \text{comp. } \tau}} t_1^{b_1-1} \cdots t_{n-1}^{b_{n-1}-1}$$

onde $\mathbf{X}_n \text{ comp. } \tau$ significa que $\forall i = 1, 2, \dots, n-1, X_i$ contém exatamente $i-1$ elos de τ e b_i é o número de elos de τ tais que $i \in X_l$ e $j \notin X_l$ ou vice-versa (denotamos isto por $\{i, j\} \sim X_l$ e dizemos que o elo $\{i, j\}$ "cruza" X_l)

Corolário 1.3. Seja V um potencial em pares estável em I_n , então vale a seguinte desigualdade:

$$\left| \sum_{g \in G_n} \prod_{\{i, j\} \in E_g} e^{-V_{ij}} - 1 \right| \leq e^{\sum_{i=1}^n B_i} \sum_{\tau \in T_n} \prod_{\{i, j\} \in E_\tau} F_{ij} \quad (1.10)$$

onde

$$F_{ij} = \begin{cases} |e^{V_{ij}} - 1| \equiv 1, & \text{se } V_{ij} = +\infty \\ |V_{ij}|, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

Capítulo 2

O gás de polímeros abstrato

2.1 Prelúdio

A teoria do gás abstrato de polímeros começa escolhendo-se um conjunto enumerável qualquer \mathcal{P} . Os elementos de \mathcal{P} serão chamados de polímeros.

A cada polímero $\gamma \in \mathcal{P}$, associamos um número complexo z_γ (um número real em situações físicas) que será interpretado como a *atividade* do polímero γ . Denotaremos por $z = \{z_\gamma\}_{\gamma \in \mathcal{P}}$ e para qualquer $\Lambda \subset \mathcal{P}$, $z_\Lambda = \{z_\gamma\}_{\gamma \in \Lambda}$.

Em situações gerais, polímeros interagem via um potencial em pares. A saber, a energia E de uma configuração $(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n)$ de n polímeros é dada por:

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

onde o potencial em pares $V(\gamma_i, \gamma_j)$ é uma função simétrica em $\mathcal{P} \times \mathcal{P}$ tomando valores em $\mathbb{R} \cup \{+\infty\}$. Note que não assumimos que o potencial seja sempre atrativo ou repulsivo. Assim o sinal de $V(\gamma_i, \gamma_j)$ pode ser positivo para alguns pares e negativo para outros.

Um potencial em pares $V(\gamma_i, \gamma_j)$ induz uma relação \mathcal{R}_V em $\mathcal{P} \times \mathcal{P}$. A saber, dizemos que um par (γ, γ') pertence a \mathcal{R}_V se, e somente se, $V(\gamma, \gamma') = +\infty$. Pela definição de $V(\gamma, \gamma')$, é imediato verificar que \mathcal{R}_V é uma relação simétrica. Quando $(\gamma, \gamma') \in \mathcal{R}_V$, (isto é, $V(\gamma, \gamma') = +\infty$), escrevemos como antes $\gamma \approx \gamma'$ e dizemos que γ e γ' são *incompatíveis*. Analogamente, se $(\gamma, \gamma') \notin \mathcal{R}_V$ dizemos que os polímeros γ e γ' são *compatíveis* e escrevemos $\gamma \sim \gamma'$. Note que, se V fosse tal que tornasse \mathcal{R}_V reflexiva, então $\gamma \approx \gamma, \forall \gamma \in \mathcal{P}$. A relação \mathcal{R}_V induzida por V é chamada de *relação de incompatibilidade*.

Fixamos agora um conjunto $\Lambda \subset \mathcal{P}$. Então, para $z_\gamma \geq 0$, a probabilidade de ocorrer a configuração $(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \Lambda^n$ é dada por:

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

onde a constante de normalização Ξ_Λ é a função de partição do Grand Canonical Ensemble no volume Λ e é dada por:

$$\Xi_\Lambda(z_\Lambda) = 1 + \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \Lambda^n} z_{\gamma_1} z_{\gamma_2} \dots z_{\gamma_n} e^{-\sum_{1 \leq i < j \leq n} V(\gamma_i, \gamma_j)} \quad (2.1)$$

Note que aquelas configurações em que existe um par $\gamma_i \approx \gamma_j$ possuem probabilidade zero de ocorrer, isto é, elas são proibidas.

Para assumir que o potencial em pares V não é puramente repulsivo ou atrativo, vamos requerer que a energia potencial E seja estável no sentido descrito em (1.1) e (1.4). Por esta razão, reescreveremos as definições de estabilidade e ultraestabilidade para o gás de polímeros abstrato.

Definição 2.1. *Um potencial $V(\gamma_i, \gamma_j)$ é estável se, existe uma função $B(\gamma) \geq 0$ tal que, $\forall n \in \mathbb{N}$ e todo $(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n$, temos:*

$$\sum_{1 \leq i < j \leq n} V(\gamma_i, \gamma_j) \geq - \sum_{i=1}^n B(\gamma_i) \quad (2.2)$$

Observe que se algum par (γ_i, γ_j) é incompatível, então a desigualdade é trivialmente satisfeita.

Definição 2.2. *Um potencial $V(\gamma_i, \gamma_j)$ é ultra-estável se, existe uma função $B(\gamma) \geq 0$ tal que, $\forall n$ e todo $(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n$ não contendo pares incompatíveis, temos:*

$$\sum_{j=2}^n V(\gamma_1, \gamma_j) \geq -2B(\gamma_1) \quad (2.3)$$

Como antes, é fácil mostrar que a ultraestabilidade implica estabilidade. Embora o contrário ainda seja falso.

Definição 2.3. *Um potencial $V(\gamma_i, \gamma_j)$ é puramente hard core se, $\forall \gamma \in \mathcal{P}$; temos $V(\gamma, \gamma) = +\infty$ e todos os pares compatíveis $\gamma \sim \gamma'$ são tais que $V(\gamma, \gamma') = 0$*

A “pressão” do gás de polímeros é definida pela fórmula

$$P_\Lambda(z_\Lambda) = \frac{1}{|\Lambda|} \log \Xi_\Lambda(z_\Lambda) \quad (2.4)$$

Apesar da função de partição $\Xi_\Lambda(z_\Lambda)$ divergir quando $\Lambda \rightarrow \mathcal{P}$, supõe-se que a pressão $P_\Lambda(z_\Lambda)$ tenha um limite finito pelo menos quando z varia em algum polidisco $|z_\gamma| \leq \rho_\gamma$ com $\rho = \{\rho_\gamma\}_{\gamma \in \mathcal{P}}$ sendo um alguma função positiva $\rho : \mathcal{P} \rightarrow$

$\mathbb{R}^+ : \gamma \longrightarrow \rho_\gamma$ independente de Λ . Assim, em princípio seria possível encontrar um limite superior para $|P(z_\Lambda)|$ uniforme em Λ .

É possível escrever a pressão (2.4) como uma série formal por meio da expansão de Mayer do fator de Gibbs, $\exp \left\{ \sum_{1 \leq i < j \leq n} V(\gamma_i, \gamma_j) \right\}$.

Como vimos na Seção 1.1, com $V(\gamma_i, \gamma_j)$ no lugar de V_{ij} :

$$e^{-\sum_{1 \leq i < j \leq n} V(\gamma_i, \gamma_j)} = \sum_{k=1}^n \sum_{\substack{\{P_1, P_2, \dots, P_k\} \\ \text{part.de}\{1, 2, \dots, n\}}} \phi_U^T(P_1, \gamma_{P_1}) \cdots \phi_U^T(P_k, \gamma_{P_k}) \quad (2.5)$$

com $\{P_1, P_2, \dots, P_k\}$ partições do conjunto $\{1, 2, \dots, n\}$ e

$$\phi_U^T(P, \gamma_P) = \begin{cases} \sum_{g \in G_P} \prod_{\{i, j\} \in E_g} (e^{-V(\gamma_i, \gamma_j)} - 1), & \text{se } |P| > 1 \\ 1, & \text{se } |P| = 1 \end{cases} \quad (2.6)$$

A função de partição Ξ_Λ fica:

$$\begin{aligned} \Xi_\Lambda(z_\Lambda) &= 1 + \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \Lambda^n} z_{\gamma_1} z_{\gamma_2} \cdots z_{\gamma_n} e^{\sum_{1 \leq i < j \leq n} V(\gamma_i, \gamma_j)} = \\ &= 1 + \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \Lambda^n} z_{\gamma_1} z_{\gamma_2} \cdots z_{\gamma_n} \sum_{k=1}^n \sum_{\substack{\{P_1, P_2, \dots, P_k\} \\ \text{part.de}\{1, 2, \dots, n\}}} \prod_{i=1}^k \phi_U^T(P_i, \gamma_{P_i}) \end{aligned} \quad (2.7)$$

As partições do conjunto $\{1, 2, \dots, n\}$ induzem partições nas configurações dos polímeros $(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \Lambda^n$. Deste modo (2.7) torna-se:

$$\Xi_\Lambda(z_\Lambda) = 1 + \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \sum_{k=1}^n \sum_{\substack{\{P_1, P_2, \dots, P_k\} \\ \text{part.de}\{1, 2, \dots, n\}}} \prod_{i=1}^k \left[\sum_{\gamma_{P_i} \in \Lambda^{|P_i|}} \phi_U^T(P_i, \gamma_{P_i}) \prod_{h \in P_i} z_{\gamma_h} \right]$$

onde se $P_i = \{p_1, p_2, \dots, p_m\}$ então $\gamma_{P_i} = (\gamma_{p_1}, \gamma_{p_2}, \dots, \gamma_{p_m})$.

Mas,

$$\begin{aligned} \sum_{\gamma_{P_i} \in \Lambda^{|P_i|}} \phi_U^T(P_i, \gamma_{P_i}) \prod_{h \in P_i} z_{\gamma_h} &= \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_{|P_i|}) \in \Lambda^{|P_i|}} \phi^T(\gamma_1, \dots, \gamma_{|P_i|}) z_{\gamma_1} \cdots z_{\gamma_{|P_i|}} \\ &\equiv \phi_{|P_i|}(z_\Lambda) \end{aligned} \quad (2.8)$$

Isto porque $\gamma_{p_1}, \dots, \gamma_{p_m}$ são arbitrários e portanto só dependem da cardinalidade do conjunto P_i . Daí,

$$\sum_{\substack{\{P_1, P_2, \dots, P_k\} \\ \text{part.de}\{1, 2, \dots, n\}}} \prod_{i=1}^k \phi_{|P_i|}(z_\Lambda) = \frac{1}{k!} \sum_{\substack{n_1, \dots, n_k: n_i > 0 \\ n_1, \dots, n_k = n}} \frac{n!}{n_1! \cdots n_k!} \prod_{i=1}^k \phi_{n_i}(z_\Lambda)$$

E

$$\begin{aligned}
\Xi_\Lambda(z_\Lambda) &= 1 + \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \sum_{k=1}^n \sum_{\substack{n_1, \dots, n_k: n_i > 0 \\ n_1, \dots, n_k = n}} \frac{n!}{k! n_1! \dots n_k!} \prod_{i=1}^k \phi_{n_i}(z_\Lambda) \\
&= 1 + \sum_{k \geq 1} \frac{1}{k!} \sum_{n=k}^{\infty} \sum_{\substack{n_1, \dots, n_k: n_i > 0 \\ n_1, \dots, n_k = n}} \prod_{i=1}^k \frac{\phi_{n_i}(z_\Lambda)}{n_i!} \\
&= 1 + \sum_{k \geq 1} \frac{1}{k!} \sum_{n_1=1}^{\infty} \dots \sum_{n_k=1}^{\infty} \prod_{i=1}^k \frac{\phi_{n_i}(z_\Lambda)}{n_i!} \\
&= 1 + \sum_{k \geq 1} \frac{1}{k!} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\phi_n(z_\Lambda)}{n!} \right)^k
\end{aligned}$$

Lembrando (2.8) temos:

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

Obtemos:

$$\log \Xi_\Lambda(z_\Lambda) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \Lambda^n} \phi^T(\gamma_1, \dots, \gamma_n) z_{\gamma_1} \dots z_{\gamma_n} \quad (2.9)$$

com

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

onde $\sum_{g \in G_n}$ é a soma sobre todos os grafos em I_n .

A equação (2.9) só faz sentido para aqueles $z \in \mathbb{C}^{\mathcal{P}}$ em que a série converge absolutamente. Estudaremos a convergência absoluta desta série, definindo:

$$|\log \Xi|_\Lambda(\rho_\Lambda) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \Lambda^n} |\phi^T(\gamma_1, \dots, \gamma_n)| \rho_{\gamma_1} \dots \rho_{\gamma_n} \quad (2.10)$$

para $\rho \in (0, +\infty)^{\mathcal{P}}$. Observe que

$$|\log \Xi_\Lambda(z_\Lambda)| \leq |\log \Xi|_\Lambda(\rho_\Lambda)$$

para todo $z \in \mathbb{C}^\Lambda$ no polidisco $\{|z_\gamma| \leq \rho_\gamma\}_{\gamma \in \Lambda}$. Então, se provarmos que a série (2.10) converge, para todo Λ , em algum valor de $\rho = \{\rho_\gamma\}_{\gamma \in \mathcal{P}} \in (0, +\infty)^{\mathcal{P}}$, provaremos que (2.9) converge absolutamente, para todo Λ , no polidisco $\{|z_\gamma| \leq \rho_\gamma\}_{\gamma \in \Lambda}$.

Definiremos também outra função diretamente ligada à (2.9). Fixado $\gamma_0 \in \mathcal{P}$ seja:

$$|\Sigma_{\gamma_0}|(\rho) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n \\ \exists i: \gamma_i = \gamma_0}} |\phi^T(\gamma_1, \dots, \gamma_n)| \rho_{\gamma_1} \cdots \rho_{\gamma_n} \quad (2.11)$$

Note que

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n \\ \exists i: \gamma_i = \gamma_0}} &= \sum_{(\gamma_1 = \gamma_0, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n} + \sum_{(\gamma_1, \gamma_2 = \gamma_0, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n} + \cdots + \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n = \gamma_0) \in \mathcal{P}^n} \\ &= \sum_{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n} \frac{n}{m_{\gamma_0}(\gamma_1, \dots, \gamma_n)} \end{aligned}$$

onde

$$m_{\gamma_0}(\gamma_1, \dots, \gamma_n) = |\{i \in \{1, 2, \dots, n\} : \gamma_i = \gamma_0\}|$$

Podemos reescrever (2.11) como:

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

Convém definir também a seguinte equação:

$$|\Pi|_{\gamma_0}(\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n} |\phi^T(\gamma_0, \dots, \gamma_n)| \rho_1 \cdots \rho_n \quad (2.12)$$

Note que as séries (2.11) e (2.12) estão diretamente relacionadas, pois:

$$|\Sigma|_{\gamma_0}(\rho) = \rho_{\gamma_0} \int_0^1 |\Pi|_{\gamma_0}(\rho(\alpha)) d\alpha$$

com

$$\rho_{\gamma}(\alpha) = \begin{cases} \rho_{\gamma}, & \text{se } \gamma \neq \gamma_0 \\ \alpha \rho_{\gamma}, & \text{se } \gamma = \gamma_0 \end{cases}$$

Temos que

$$|\Sigma|_{\gamma_0}(\rho) \leq \rho_{\gamma_0} |\Pi|_{\gamma_0}(\rho)$$

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

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

Logo, se somos capazes de mostrar a convergência de $|\Pi|_{\gamma_0}(\rho)$ para algum valor da função $\rho \in (0, +\infty)^{\mathcal{P}}$, também mostraremos a convergência absoluta da

pressão $|P_\Lambda(z_\Lambda)|$, para todo Λ , quando z está no polidisco $\{|z_\gamma| \leq \rho_\gamma\}_{\gamma \in \mathcal{P}}$ e que neste polidisco vale o seguinte cota uniforme em Λ :

$$|P_\Lambda(z_\Lambda)| \leq \sup_{\gamma_0 \in \mathcal{P}} \rho_{\gamma_0} |\Pi|_{\gamma_0}(\rho)$$

De agora em diante, vamos nos ocupar com a convergência absoluta da série $|\Pi|_{\gamma_0}(\rho)$ definida em (2.12).

Para entender o significado físico das séries $|\Pi|_{\gamma_0}(\rho)$ e $|\Sigma|_{\gamma_0}(\rho)$ considere as seguintes funções definidas em um conjunto finito $\Lambda \subset \mathcal{P}$:

$$\Sigma_{\gamma_0}(z_\Lambda) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \Lambda^n \\ \exists i: \gamma_i = \gamma_0}} \phi^T(\gamma_1, \dots, \gamma_n) z_{\gamma_1} \cdots z_{\gamma_n}$$

e

$$\Pi_{\gamma_0}(z_\Lambda) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \Lambda^n} \phi^T(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n) z_{\gamma_1} \cdots z_{\gamma_n}$$

Estas equações estão diretamente relacionadas com $\log \Xi_\Lambda(z_\Lambda)$. Observe que

$$\Pi_{\gamma_0}(z_\Lambda) = \frac{\partial}{\partial z_{\gamma_0}} \log \Xi_\Lambda(z_\Lambda)$$

e

$$\Sigma_{\gamma_0}(z_\Lambda) = \log \Xi_\Lambda(z_\Lambda) - \log \Xi_{\Lambda \setminus \gamma_0}(z_\Lambda)$$

Portanto,

$$\begin{aligned} \Sigma_{\gamma_0}(z_\Lambda) &= \int_0^1 \frac{\partial}{\partial \alpha} \log \Xi_\Lambda(z_\Lambda(\alpha)) d\alpha = z_{\gamma_0} \int_0^1 \frac{\partial}{\partial z_{\gamma_0}} \log \Xi_\Lambda(z_\Lambda(\alpha)) d\alpha \\ &= z_{\gamma_0} \int_0^1 \Pi_{\gamma_0}(z_\Lambda(\alpha)) d\alpha \end{aligned}$$

onde

$$z_{\gamma_0}(\alpha) = \begin{cases} z_\gamma, & \text{se } \gamma \neq \gamma_0 \\ \alpha z_\gamma, & \text{se } \gamma = \gamma_0 \end{cases}$$

2.2 O caso hard core

Vamos agora estudar o gás de polímeros abstrato interagindo via um potencial puramente hard core. Como antes, dizemos que um par (γ, γ') são *incompatíveis* se, e somente se, $V(\gamma, \gamma') = \infty$ e escrevemos $\gamma \approx \gamma'$. Por outro lado, se $V(\gamma, \gamma') = 0$ dizemos que o par (γ, γ') é *compatível* e escrevemos $\gamma \sim \gamma'$. Observe que pela definição de potencial puramente hard core devemos ter $\gamma \approx \gamma, \forall \gamma \in \mathcal{P}$.

A função de partição do gás de polímeros com potencial hard core é:

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

esta função é analítica em todo $\mathbb{C}^{|\Lambda|}$, uma vez que admite a seguinte cota:

$$|\Xi_{\Lambda}(z_{\Lambda})| \leq e^{\sum_{\gamma \in \Lambda} |z_{\gamma}|}$$

A “pressão” do gás hard core é definida por meio da fórmula:

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

Como na sessão anterior,

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

onde $\phi^T(\gamma_1, \dots, \gamma_n)$ é definido em (2.9).

Dada uma n -upla $(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n$, podemos sempre definir um grafo $G(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{G}_n$ com elos $\{i, j\}$ se, e somente se, $\gamma_i \approx \gamma_n$. No caso do gás de polímeros hard core, temos para $n \geq 2$:

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

novamente \mathcal{G}_n é o conjunto de todos os grafos conexos ou não-conexos no conjunto $\{1, 2, \dots, n\}$ e G_n é o conjunto de todos os grafos conexos em $\{1, 2, \dots, n\}$.

Pelo Corolário 1.1, podemos reescrever $\phi^T(\gamma_1, \dots, \gamma_n)$ quando $G(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in G_n$ como:

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

Conforme dissemos na seção anterior, para mostrar a convergência absoluta da pressão precisamos apenas considerar a função definida em (2.12).

Agora, reorganizaremos a série $|\Pi_{\gamma_0}|(\rho)$ usando o corolário 1 do cap.(1) para interações via hard core.

Denotaremos por T_n^0 o conjunto de todas as árvores indexadas pelo conjunto $\{0, 1, \dots, n\}$ para as quais o vértice 0 foi escolhido como raiz e que seguem a ordem parcial definida na Seção.2 Cap.1.

Fixe $(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^{n+1}$ de modo que $G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)$ (o grafo cujos vértices estão no conjunto $\{0, 1, \dots, n\}$ e com conjunto de elos dados por $E(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n) = \{\{i, j\} : \gamma_i \approx \gamma_j\}$) seja conexo.

Seja

$$T_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)} = \{\tau \in T_n^0 : \tau \subset G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)\}$$

Lembramos que aqui $d(i)$ denota a distância (em elos) da raiz 0 ao vértice i e que o “pai” de i é representado por i' .

Definição 2.4. O conjunto das árvores de Penrose de $G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)$, denotadas por $P_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}$, é formado pelas árvores $\tau \in T_n^0$ tais que:

(t.0) se $\{i, j\} \in E_\tau$, então $\{i, j\} \in E(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n) \iff \gamma_i \approx \gamma_j$

(t.1) se dois vértices i e j são tais que $d(i) = d(j)$, então $\{i, j\} \notin E(\gamma_0, \dots, \gamma_n) \iff \gamma_i \sim \gamma_j$

(t.2) se dois vértices i e j são tais que $d(j) = d(i) - 1$ e $j > i'$, então $\{i, j\} \notin E(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n) \iff \gamma_i \sim \gamma_j$

O Corolário 1.1 nos diz que:

$$|\phi^T(\gamma_1, \dots, \gamma_n)| = \sum_{\tau \in T_n^0} \mathbb{1}_{P_G(\gamma_0, \dots, \gamma_n)}(\tau)$$

onde $\mathbb{1}_{P_G(\gamma_0, \dots, \gamma_n)}$ é a função característica do conjunto das árvores de Penrose $P_G(\gamma_0, \dots, \gamma_n)$ em T_n^0 , isto é,

$$\mathbb{1}_{P_G(\gamma_0, \dots, \gamma_n)}(\tau) = \begin{cases} 1, & \text{se } \tau \in P_G(\gamma_0, \dots, \gamma_n) \\ 0, & \text{se } \tau \notin P_G(\gamma_0, \dots, \gamma_n) \end{cases}$$

Usando este corolário, podemos reescrever (2.9) como:

$$\begin{aligned} |\Pi|_{\gamma_0}(\rho) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n} \sum_{\tau \in T_n^0} \mathbb{1}_{P_G(\gamma_0, \dots, \gamma_n)} \rho(\gamma_1) \cdots \rho(\gamma_n) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\tau \in T_n^0} \sum_{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n} \mathbb{1}_{P_G(\gamma_0, \dots, \gamma_n)} \rho(\gamma_1) \cdots \rho(\gamma_n) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\tau \in T_n^0} \phi_{\gamma_0}(\tau) \end{aligned} \tag{2.13}$$

onde

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

Isto mostra que a série $|\Pi|_{\gamma_0}(\rho)$ da equação (2.12) pode ser reorganizada como uma soma sobre árvores com índices. Note que o fato de $\phi_{\gamma_0}(\tau)$ depender dos índices da árvore τ se deve a condição (t.2) das árvores de Penrose.

Mostraremos agora que novas cotas para $|\phi^T(\gamma_1, \dots, \gamma_n)|$ podem ser obtidas escolhendo-se novas famílias de árvores $\bar{P}_G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)$ tais que

$$P_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)} \subset \bar{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)} \subset T_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)} \text{ com}$$

$$T_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)} = \{\tau \in T_n^0 : \tau \subset G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)\}$$

Abaixo, daremos três possíveis escolhas para $\bar{P}_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}$. Cada uma delas produz um critério diferente de convergência para a cluster expansion do gás de polímeros abstrato.

Definição 2.5. O conjunto de árvores fracamente Penrose de $G(\gamma_0, \dots, \gamma_n)$, denotadas por $P_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^*$ é formado por aquelas árvores $\tau \in T_n^0$ com conjunto de elos E_τ tais que:

$$(t.0) \text{ se } \{i, j\} \in E_\tau \text{ então } \gamma_i \asymp \gamma_j, \text{ isto é, } \tau \subset G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)$$

$$(t.1)^* \text{ se } i \text{ e } j \text{ são irmãos, então } \gamma_i \sim \gamma_j$$

Definição 2.6. O conjunto de árvores de Dobrushin de $G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)$, denotadas por $P_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^{Dob}$ é formado por aquelas árvores $\tau \in T_n^0$ com conjunto de elos E_τ tais que:

$$(t.0) \text{ se } \{i, j\} \in E_\tau \text{ então } \gamma_i \asymp \gamma_j$$

$$(t.1)^D \text{ se } i \text{ e } j \text{ são irmãos, então } \gamma_i \neq \gamma_j, \text{ isto é, } \gamma_i \sim \gamma_j \text{ ou } \gamma_i \asymp \gamma_j$$

Definição 2.7. O conjunto de árvores de Kotecký-Preiss de $G(\gamma_0, \dots, \gamma_n)$, denotadas por $P_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^{KIP}$ é formado por aquelas árvores $\tau \in T_n^0$ com conjunto de vértices E_τ tais que:

$$(t.0) \text{ se } \{i, j\} \in E_\tau \text{ então } \gamma_i \asymp \gamma_j$$

Pelas definições acima, segue que:

$$P_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)} \subset P_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^* \subset P_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^{Dob} \subset P_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^{KIP} \subset T_{G(\gamma_0, \dots, \gamma_n)}$$

Em particular, a definição (2.4) implica

$$P_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^{KIP} = T_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}$$

Assim,

$$|\phi^T(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)| \leq |P_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^*| = \sum_{\tau \in T_n^0} \mathbb{1}_{\tau \in P_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^*} \quad (2.14)$$

$$\leq |P_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^{Dob}| = \sum_{\tau \in T_n^0} \mathbb{1}_{\tau \in P_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^{Dob}} \quad (2.15)$$

$$\leq |P_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^{KP}| = \sum_{\tau \in T_n^0} \mathbb{1}_{\tau \in T_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}} \quad (2.16)$$

Daí, podemos limitar a série $|\Pi|_{\gamma_0}(\rho)$ usando (2.14) que é a melhor das três cotas obtidas. Então,

$$\begin{aligned} |\Pi|_{\gamma_0}(\rho) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n} |\phi^T(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)| \rho(\gamma_1) \cdots \rho(\gamma_n) \\ &\leq \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n} \sum_{\tau \in T_n^0} \mathbb{1}_{\tau \in P_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^*} \rho(\gamma_1), \dots, \rho(\gamma_n) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\tau \in T_0^n} \sum_{(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)} \mathbb{1}_{\tau \in P_{G(\gamma_0, \gamma_1, \dots, \gamma_n)}^*} \rho(\gamma_1), \dots, \rho(\gamma_n) \end{aligned}$$

Portanto,

$$|\Pi|_{\gamma_0}(\rho) \leq \Pi_{\gamma_0}^*(\rho) \quad (2.17)$$

onde

$$\Pi_{\gamma_0}^*(\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\tau \in T_0^n} \phi_{\gamma_0}^*(\tau, \rho) \quad (2.18)$$

com

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

Da mesma maneira, podemos usar as cotas (2.15) e (2.16) para encontrar duas séries que também limitam (2.12). A saber,

$$\Pi_{\gamma_0}^{Dob}(\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\tau \in T_0^n} \phi_{\gamma_0}^{Dob}(\tau, \rho) \quad (2.19)$$

e

$$\Pi_{\gamma_0}^{KP} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\tau \in T_0^n} \phi_{\gamma_0}^{KP}(\tau, \rho) \quad (2.20)$$

com

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

e

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

É importante enfatizar que diferente de $\phi_{\gamma_0}(\tau)$ definido em (2.13), os três fatores $\phi_{\gamma_0}^{*, Dob, KP}(\tau, \rho)$ não dependem das etiquetas da árvore τ mas apenas de sua estrutura topológica, assim os termos da série $\Pi_{\gamma_0}^0$ podem ser agrupados em termos das árvores com raiz que agora **não possuem** índices. Isto é o que faremos na próxima seção. Para concluir, vamos relembrar que as equações (2.18)-(2.20) implicam que:

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

2.2.1 Reorganização das séries $\Pi_{\gamma_0}^*(\rho)$

Agora, reorganizaremos a soma sobre as árvores $\tau \in T_n^0$, aparecendo na equação (2.18), em termos de árvores conhecidas por *árvores planares com raiz*. O que torna isto possível é o fato de $\phi_{\gamma_0}^*$ não depender da maneira como as etiquetas de τ são distribuídas. A cada árvore $\tau \in T_n^0$, podemos associar um desenho no plano chamado "árvore planar com raiz" de τ . Este desenho é obtido colocando-se os "pais" à esquerda dos "filhos" e os "irmãos" ordenados de cima para baixo consistentemente com suas etiquetas, isto é, o de menor etiqueta ocupa o topo e o de maior ocupa a última posição.

Desta forma, estamos definindo um mapa $m : \tau \mapsto m(\tau)$ que associa a cada árvore $\tau \in T_n^0$ um único desenho $t = m(\tau)$ no plano, chamado de *árvore planar com raiz* associada a τ . Denotaremos por \mathcal{T}_0^n o conjunto de todas as árvores planares com raiz contendo n vértices e por $\mathbb{T}^{0,k}$ o conjunto de todas as árvores planares com raiz cujo número máximo de geração é k e também por \mathcal{T}^0 o conjunto de todas as árvores planares com raiz. Note que $\mathcal{T}^0 = \cup_{n \geq 0} \mathcal{T}_n^0 = \cup_{k \geq 0} \mathbb{T}^{0,k}$.

Um elemento $t \in \mathcal{T}_n^0$ pode ser visto como uma classe de equivalência de elementos $\tau \in T_{n+1}^0$, a saber, dizemos que τ' é equivalente a τ se $m(\tau') = t = m(\tau)$, ou seja, se elas produzem a mesma árvore planar com raiz. Podemos também definir esta equivalência por meio de permutações no conjunto de índices $\{1, 2, \dots, n\}$, dizendo que $\tau' \in T_n^0$ é equivalente a $\tau \in T_0^n$ se existe uma permutação σ no conjunto $\{1, 2, \dots, n\}$ preservando a ordem dos filhos de cada vértice de τ de maneira que $\tau' = \sigma(\tau)$ (τ é entendido como o grafo com conjunto de vértices dado por $V_{\sigma(\tau)} = \{0, \sigma(1), \dots, \sigma(n)\}$ e conjunto de elos $E_{\sigma(\tau)} = \{\{\sigma(i), \sigma(j)\} : \{i, j\} \in E_{\tau}\}$).

O conjunto de todas as classes de equivalência é o conjunto das árvores planares com n vértices diferentes da raiz.

É obvio que o mapa $m : \tau \mapsto m(\tau) = t$ não é injetivo e a cardinalidade da pré-imagem de uma árvore planar com raiz t , isto é, o número de maneiras que os n vértices diferentes da raiz podem ser indexados de forma a respeitar a ordem "cima para baixo" em todos os vértices de τ , é dado por:

$$|\{\tau \in T_{n+1}^0 : m(\tau) = t\}| = \frac{n!}{\prod_{i \geq 0} s_i!}$$

Basta observar que $\prod_{i \geq 0} s_i!$ é o número de maneiras em que desrespeitamos a ordem "cima para baixo" dos vértices de τ .

Deste modo, o número de árvores $\tau \in T_n^0$ que pertencem a mesma classe de equivalência t , ou seja, aquelas associadas a mesma árvore planar com raiz, é:

$$|[\tau]| = \frac{n!}{\prod_{i \geq 0} s_i!}$$

onde $t = [\tau]$ é a árvore planar com raiz associada a τ caracterizada pela sequência $\{s_i\}_{i \geq 0}$.

Uma árvore planar com raiz $t \in T_n^0$ pode ser representado de maneira única como uma sequência hierárquica de inteiros. A saber, associamos um inteiro $s_0 \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ a raiz 0 . Se $s_0 = 0$ então t é a árvore trivial composta apenas da raiz. Se $s_0 \geq 1$, isto significa que a árvore bifurca em s_0 ramos que terminam em s_0 vértices $v_0^1, v_0^2, \dots, v_0^{s_0}$ (filhos da raiz), e por convenção eles estão ordenados de cima para baixo no desenho. Para continuar a construção de t , agora associamos a cada um dos vértices $v_0^1, \dots, v_0^{s_0}$ os inteiros não-negativos $s_{v_0^1}, s_{v_0^2}, \dots, s_{v_0^{s_0}}$ significando que o vértice v_0^i bifurca em $s_{v_0^i}$ ramos com $i = 1, 2, \dots, s_0$ (se $s_{v_0^i} = 0$ o processo termina) e assim por diante até que o vértice v^{s_0} bifurque em $s_{v^{s_0}}$ ramos. O processo então é iterado. Assim, qualquer árvore planar com raiz t pode ser representada de maneira única por uma sequência hierárquica de inteiros não-negativos:

$$\{s_0\}, \{s_{v_0^1}, s_{v_0^2}, \dots, s_{v_0^{s_0}}\}, \dots, \{0, 0, \dots, 0\}$$

Deste modo, denotaremos abreviadamente uma árvore planar com raiz como:

$$t = \{s_v\}_{v \geq 0}$$

Agora, observe que o fator $\phi_{\gamma_0}^*(\tau, \rho)$ depende apenas da árvore planar com raiz associada a τ . Daí,

$$\phi_{\gamma_0}^*(\tau, \rho) = \phi_{\gamma_0}^*([\tau], \rho) = \phi_{\gamma_0}^*(t, \rho) = \prod_{v \geq 0} \left[\sum_{\substack{(\gamma_{v^1}, \gamma_{v^2}, \dots, \gamma_{v^{s_v}}) \in \mathcal{P}^{s_v} \\ \gamma_v \sim \gamma_{v^i} \quad \gamma_{v^i} \sim \gamma_{v^j}}} \rho(\gamma_{v^1}) \cdots \rho(\gamma_{v^{s_v}}) \right]$$

Note que, em cada vértice v a soma dos polímeros $\gamma_{v^1}, \gamma_{v^2}, \dots, \gamma_{v^{s_v}}$ associados aos filhos de v depende do polímero γ_v . Desta maneira, a ordem do produto na equação acima é relevante e organizado de modo que os antecessores estão à esquerda dos descendentes. Por convenção, assumimos que um vértice v tal que $s_v = 0$ contribui com 1 no produto acima.

Podemos agora reorganizar o lado direito de (2.18) como segue:

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

Portanto,

$$\begin{aligned}
\Pi_{\gamma_0}^*(\rho) &= \sum_{t \in \mathcal{T}_n^0} \prod_{v \geq 0} \left\{ \frac{1}{s_v!} \sum_{(\gamma_{v^1}, \gamma_{v^2}, \dots, \gamma_{v^{s_v}}) \in \mathcal{P}^{s_v}} \prod_{i=1}^{s_v} \mathbb{1}_{\{\gamma_v \sim \gamma_{v^i}\}} \prod_{1 \leq i < j \leq s_v} \mathbb{1}_{\{\gamma_{v^i} \sim \gamma_{v^j}\}} \rho(\gamma_{v^1}) \cdots \rho(\gamma_{v^{s_v}}) \right\} \quad (2.21)
\end{aligned}$$

De modo completamente análogo, obtemos:

$$\begin{aligned}
\Pi_{\gamma_0}^{Dob}(\rho) &= \sum_{t \in \mathcal{T}_n^0} \prod_{v \geq 0} \left\{ \frac{1}{s_v!} \sum_{(\gamma_{v^1}, \gamma_{v^2}, \dots, \gamma_{v^{s_v}}) \in \mathcal{P}^{s_v}} \prod_{i=1}^{s_v} \mathbb{1}_{\{\gamma_v \sim \gamma_{v^i}\}} \prod_{1 \leq i < j \leq s_v} \mathbb{1}_{\{\gamma_{v^i} \neq \gamma_{v^j}\}} \rho(\gamma_{v^1}) \cdots \rho(\gamma_{v^{s_v}}) \right\} \quad (2.22)
\end{aligned}$$

e também

$$\begin{aligned}
\Pi_{\gamma_0}^{KP}(\rho) &= \sum_{t \in \mathcal{T}_n^0} \prod_{v \geq 0} \left\{ \frac{1}{s_v!} \sum_{(\gamma_{v^1}, \gamma_{v^2}, \dots, \gamma_{v^{s_v}}) \in \mathcal{P}^{s_v}} \prod_{i=1}^{s_v} \mathbb{1}_{\{\gamma_v \sim \gamma_{v^i}\}} \rho(\gamma_{v^1}) \cdots \rho(\gamma_{v^{s_v}}) \right\} \quad (2.23)
\end{aligned}$$

2.2.2 Árvores e convergência

Dadas duas funções $\mu = \{\mu_\gamma\}_{\gamma \in \mathcal{P}}$ e $\nu = \{\nu_\gamma\}_{\gamma \in \mathcal{P}}$, dizemos que $\mu < \nu \iff \mu_\gamma < \nu_\gamma$, para todo $\gamma \in \mathcal{P}$.

Vamos considerar, para todo $n \in \mathbb{N}$ e para todo $(\gamma_0; \gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^{n+1}$, números $b_n(\gamma_0; \gamma_1, \dots, \gamma_n)$ tais que $b_n(\gamma_0; \gamma_1, \dots, \gamma_n) \geq 0$. Dados tais funções $b_n(\gamma_0; \gamma_1, \dots, \gamma_n)$, podemos definir a seguinte função:

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

cujas entradas são:

$$[\varphi^b(u)](\gamma) \doteq \varphi_\gamma^b(u) = 1 + \sum_{n \geq 1} \sum_{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n} b_n(\gamma; \gamma_1, \dots, \gamma_n) u(\gamma_1) \cdots u(\gamma_n) \quad (2.24)$$

Definimos também o conjunto

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

Deste modo, a restrição de φ a \mathcal{D}^b define uma função em $(0, +\infty)^{\mathcal{P}}$, isto é,

$$\varphi_\gamma^b(u) < +\infty, \quad \forall \gamma \in \mathcal{P}, \quad \text{sempre que } u \in \mathcal{D}^b \quad (2.25)$$

Note que, se $u \in \mathcal{D}^b$ e $u' < u$, então $u' \in \mathcal{D}^b$.

Seja $\mu : \mathcal{P} \rightarrow (0, +\infty)^{\mathcal{P}}$ uma função no conjunto \mathcal{D}^b , definimos:

$$r = \frac{\mu}{\varphi^b(\mu)}$$

cujas entradas são dadas por;

$$r(\gamma) = \frac{\mu(\gamma)}{\varphi_\gamma^b(\mu)}, \quad \gamma \in \mathcal{P} \quad (2.26)$$

Por construção, $r \in \mathcal{D}^b$. E também $r(\gamma) > 0$, $\forall \gamma \in \mathcal{P}$ pois, $\mu \in (0, +\infty)^{\mathcal{P}}$ e $\mu \in \mathcal{D}^b$ o que implica $\varphi_\gamma^b(\mu) < +\infty$, $\forall \gamma \in \mathcal{P}$.

Considere agora, para qualquer $\rho \in \mathcal{D}^b$, o mapa $T^\rho = \rho \varphi^b$ dado por:

$$T^\rho : \mathcal{D}^b \rightarrow (0, +\infty]^{\mathcal{P}} : u \mapsto T^\rho(u)$$

com entradas

$$[T^\rho(u)](\gamma) \doteq T_\gamma^\rho(u) = \rho(\gamma) \varphi_\gamma^b(u), \quad \gamma \in \mathcal{P} \quad (2.27)$$

de (2.26) e (2.27) segue que:

$$\mu = T^r(\mu) \quad (2.28)$$

Ou seja, μ é um ponto fixo para o mapa T^r . Assim, por (2.28), $\forall \gamma_0 \in \mathcal{P}$ temos:

$$\begin{aligned} \mu(\gamma_0) &= T^r_{\gamma_0}(\mu) = \\ &r(\gamma_0) + r(\gamma_0) \sum_{\gamma_1 \in \mathcal{P}} b_1(\gamma_0; \gamma_1) \mu(\gamma_1) + r(\gamma_0) \sum_{(\gamma_1, \gamma_2) \in \mathcal{P}^2} b_2(\gamma_0; \gamma_1, \gamma_2) \mu(\gamma_1) \mu(\gamma_2) + \dots \\ &\dots + r(\gamma_0) \sum_{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n} b_n(\gamma_0; \gamma_1, \dots, \gamma_n) \mu(\gamma_1) \dots \mu(\gamma_n) + \dots \end{aligned} \quad (2.29)$$

A equação (2.29), pode ser visualizada da seguinte forma:

$$\bullet_{\gamma_0} \doteq \mu(\gamma_0) = T^r_{\gamma_0}(\mu) \doteq \circ_{\gamma_0} + \circ_{\gamma_0} - \bullet_{\gamma_1} + \circ_{\gamma_0} \begin{array}{l} \bullet_{\gamma_1} \\ \bullet_{\gamma_2} \end{array} + \dots + \circ_{\gamma_0} \begin{array}{l} \bullet_{\gamma_1} \\ \bullet_{\gamma_2} \\ \vdots \\ \bullet_{\gamma_n} \end{array} + \dots$$

onde

$$\circ_{\gamma_0} = r(\gamma_0)$$

e, para qualquer $n \geq 1$

$$\circ_{\gamma_0} \begin{array}{l} \bullet_{\gamma_1} \\ \bullet_{\gamma_2} \\ \vdots \\ \bullet_{\gamma_n} \end{array} = r(\gamma_0) \sum_{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n} b_n(\gamma_0; \gamma_1, \dots, \gamma_n) \mu(\gamma_1) \dots \mu(\gamma_n)$$

A iteração $[T^r]^2(\mu) = T^r(T^r(\mu))$ corresponde a trocar cada uma das bolas pretas pelo diagrama correspondente da expansão de T^r .

Isto leva a árvores planares com raiz de no máximo três gerações, sendo que nos vértice das primeiras duas gerações temos bolas brancas e nos vértices da terceira geração temos bolas pretas. A k -ésima iteração leva a todas as possíveis árvores planares com raiz tendo no máximo $k+1$ gerações, sendo que nos vértices das k primeiras gerações temos bolas brancas e bolas pretas nos vértices da $(k+1)$ -ésima geração. Vamos denotar por $\mathcal{T}^{0,k}$ o conjunto de todas as árvores com raiz zero contendo no máximo k gerações. Um argumento indutivo direto mostra que:

$$[T^r]_{\gamma_0}^k(\mu) = r(\gamma_0) \left[\sum_{l=0}^{k-1} \Phi_{\gamma_0}^{(l)}(r) + R_{\gamma_0}^{(k)}(r, \mu) \right] \quad (2.30)$$

com

$$\Phi_{\gamma_0}^{(l)}(r) = \sum_{t \in \mathcal{T}^{0,l}} \prod_{v \geq 0} \left\{ \sum_{(\gamma_{v1}, \dots, \gamma_{v^{sv}}) \in \mathcal{P}^{sv}} b_{s_v}(\gamma_0; \gamma_{v1}, \dots, \gamma_{v^{sv}}) r(\gamma_{v1}) \cdots r(\gamma_{v^{sv}}) \right\} \quad (2.31)$$

e

$$R_{\gamma_0}^{(k)}(r, \mu) = \sum_{t \in \mathcal{T}^{0,k}} \prod_{v \geq 0} \left\{ \sum_{(\gamma_{v1}, \dots, \gamma_{v^{sv}}) \in \mathcal{P}^{sv}} b_{s_v}(\gamma_0; \gamma_{v1}, \dots, \gamma_{v^{sv}}) \chi_{\gamma_{v1}}^{t, v^1} \cdots \chi_{\gamma_{v^{sv}}}^{t, v^{sv}} \right\} \quad (2.32)$$

onde

$$\chi_{\gamma_v}^{t, v} = \begin{cases} r(\gamma), & \text{se } d(v) < k \\ \rho(\gamma), & \text{se } d(v) = k \end{cases} \quad (2.33)$$

onde $d(v)$ é o número de geração de v em t e assumimos que $b_0(\gamma_v) = 1$. Por (2.29), temos:

$$[T^r]_{\gamma_0}^k(\mu) = \mu(\gamma_0)$$

que implica imediatamente, por meio de (2.30),

$$r(\gamma_0) \sum_{l=0}^{k-1} \Phi_{\gamma_0}^{(l)}(r) \leq \mu(\gamma_0), \quad \text{para todo } k \in \mathbb{N} \quad (2.34)$$

Esta equação implica imediatamente o seguinte lema.

Lema 2.1. *Sejam $\mu : \mathcal{P} \rightarrow (0, +\infty)^{\mathcal{P}}$ tal que $\mu \in \mathcal{D}^b$ e $\varphi_{\gamma}^b(\mu)$ a função definida por (2.24) e (2.25). Considere $r \in (0, +\infty)^{\mathcal{P}}$ como definido em (2.26). Então para todo $\rho \leq r$:*

A série

$$\Phi_{\gamma_0}^b(\rho) \doteq \sum_{t \in \mathcal{T}^0} \prod_{v \geq 0} \left\{ \sum_{(\gamma_{v1}, \dots, \gamma_{v^{sv}}) \in \mathcal{P}^{sv}} b_{s_v}(\gamma_0; \gamma_{v1}, \dots, \gamma_{v^{sv}}) \rho(\gamma_{v1}) \cdots \rho(\gamma_{v^{sv}}) \right\} \quad (2.35)$$

converge para todo $\gamma_0 \in \mathcal{P}$ e admite os seguintes limites:

$$\Phi_{\gamma_0}^b(\rho) \leq \Phi_{\gamma_0}^b(r) \leq \varphi_{\gamma_0}^b(\mu), \quad \forall \gamma_0 \in \mathcal{P}$$

Demonstração. Por (2.34) temos:

$$r(\gamma_0) \sum_{l=0}^n \Phi_{\gamma_0}^{(l)}(r) \leq T_{\gamma_0}^{n+1}(\mu), \quad \forall n \in \mathbb{N}$$

mas, por definição, temos para qualquer $k \in \mathbb{N}$ que $T_{\gamma_0}^k(\mu) = \mu(\gamma_0)$. Então obtemos

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

mas por (2.26) vem:

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

e por monotonicidade, para qualquer $\rho \leq r$, temos

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

□

2.2.3 Critérios de convergência

Critério de Fernández-Procacci

Escolhemos

$$b_n(\gamma_0; \gamma_1, \dots, \gamma_n) = b_n^{FP}(\gamma_0; \gamma_1, \dots, \gamma_n) \doteq \frac{1}{n!} \prod_{i=1}^n \mathbb{1}_{\{\gamma_0 \not\sim \gamma_i\}} \prod_{1 \leq i < j \leq n} \mathbb{1}_{\{\gamma_i \sim \gamma_j\}} \quad (2.36)$$

e deste modo

$$\varphi_{\gamma_0}^{b^{FP}}(\mu) = 1 + \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n \\ \gamma_0 \not\sim \gamma_i \\ \gamma_i \sim \gamma_j}} \mu(\gamma_1) \cdots \mu(\gamma_n) = \Xi_{\mathcal{P}_{\gamma_0}}(\mu) \quad (2.37)$$

Então, o lema anterior nos diz que a série

$$\Phi_{\gamma_0}^{b^{FP}}(r) = \sum_{t \in \mathcal{T}^0} \prod_{v \geq 0} \left\{ \sum_{(\gamma_{v,1}, \dots, \gamma_{v,s_v}) \in \mathcal{P}^{s_v}} \frac{1}{s_v!} \prod_{i=1}^{s_v} \mathbb{1}_{\{\gamma_v \not\sim \gamma_{v,i}\}} \prod_{1 \leq i < j \leq s_v} \mathbb{1}_{\{\gamma_{v,i} \sim \gamma_{v,j}\}} r(\gamma_{v,1}) \cdots r(\gamma_{v,s_v}) \right\} \quad (2.38)$$

converge. Comparando (2.22) com (2.38) é imediato ver que;

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

O que nos dá imediatamente o seguinte critério de convergência para a cluster expansions.

Teorema 2.1. Escolha $\mu \in \mathcal{D}^b \subset (0, +\infty)^{\mathcal{P}}$ e seja $r^* \in (0, +\infty)^{\mathcal{P}}$ definido por:

$$r^*(\gamma_0) = \frac{\mu(\gamma_0)}{\Xi_{\mathcal{P}_{\gamma_0}}(\mu)}, \quad \gamma_0 \in \mathcal{P} \quad (2.39)$$

Se ρ é tal que

$$\rho(\gamma) \leq r^*(\gamma), \quad \forall \gamma \in \mathcal{P} \quad (2.40)$$

Então, a série $|\Pi|_{\gamma_0}(\rho)$ definida em (2.12) é finita para todo $\gamma_0 \in \mathcal{P}$ e

$$|\Pi|_{\gamma_0}(\rho) \leq \Xi_{\mathcal{P}_{\gamma_0}}(\mu) \quad (2.41)$$

e portanto

$$\rho(\gamma_0) |\Pi|_{\gamma_0}(\rho) \leq \mu(\gamma_0) \quad (2.42)$$

para todo $\gamma_0 \in \mathcal{P}$.

Demonstração. Pelo lema anterior (2.1), é imediato ver que a série $\Pi_{\gamma_0}^*(\rho)$ definida em (2.18) é finita para todo $\gamma_0 \in \mathcal{P}$ e com ρ tal que $\rho \leq r^*$, sendo r^* definido em (2.39). Além disso,

$$\Pi_{\gamma_0}^*(\rho) \leq \Xi_{\mathcal{P}_{\gamma_0}}(\mu)$$

para todo $\gamma_0 \in \mathcal{P}$. Por (2.17), o mesmo vale para a série $|\Pi|_{\gamma_0}(\rho)$. \square

Critério de Dobrushin

Agora, escolhemos

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

deste modo

$$\varphi_{\gamma_0}^{b^{Dob}}(\mu) = 1 + \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n \\ \gamma_0 \not\sim \gamma_i \\ \gamma_i \neq \gamma_j}} \mu(\gamma_1) \cdots \mu(\gamma_n) = \prod_{\gamma \not\sim \gamma_0} [1 + \mu(\gamma)] \quad (2.43)$$

Novamente, o lema anterior (2.1) nos diz que a série

$$\Phi_{\gamma_0}^{b^{Dob}}(r) = \sum_{t \in T^0} \prod_{v \geq 0} \left\{ \sum_{(\gamma_{v1}, \dots, \gamma_{vs_v}) \in \mathcal{P}^{s_v}} \frac{1}{s_v!} \prod_{i=1}^{s_v} \mathbb{1}_{\{\gamma_v \not\sim \gamma_{vi}\}} \prod_{1 \leq i < j \leq s_v} \mathbb{1}_{\{\gamma_{vi} \neq \gamma_{vj}\}} r(\gamma_{v1}) \cdots r(\gamma_{vs_v}) \right\} \quad (2.44)$$

converge. Comparando (2.23) e (2.44) temos:

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

Deste modo, chegamos ao seguinte critério de convergência para cluster expansions.

Corolário 2.1 (Dobrushin). Escolha $\mu \in (0, +\infty)^{\mathcal{P}}$ e considere r^{Dob} definido por

$$r^{Dob}(\gamma) = \frac{\mu(\gamma)}{\prod_{\bar{\gamma} \sim \gamma} [1 + \mu(\bar{\gamma})]} \quad (2.45)$$

Seja $\rho \in (0, +\infty)^{\mathcal{P}}$ tal que

$$\rho(\gamma) \leq r^{Dob}(\gamma) = \frac{\mu(\gamma)}{\prod_{\bar{\gamma} \sim \gamma} [1 + \mu(\bar{\gamma})]} \quad \forall \gamma \in \mathcal{P} \quad (2.46)$$

Então, a série $|\Pi|_{\gamma_0}(\rho)$ definida em (2.12) é finita para cada $\gamma_0 \in \mathcal{P}$ e

$$|\Pi|_{\gamma}(\rho) \leq \prod_{\tilde{\gamma} \approx \gamma} [1 + \mu(\tilde{\gamma})] \quad (2.47)$$

ou

$$\rho(\gamma) |\Pi|_{\gamma}(\rho) \leq \mu(\gamma), \quad \forall \gamma \in \mathcal{P}. \quad (2.48)$$

Critério de Kotecký-Preiss

Finalmente, se escolhemos

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

e

$$\varphi_{\gamma_0}^{b^{KP}}(\mu) = 1 + \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}^n \\ \gamma_0 \approx \gamma_i \\ 1 \leq i < j \leq n}} \mu(\gamma_1) \cdots \mu(\gamma_n) = \exp\left[\sum_{\gamma \approx \gamma_0} \mu(\gamma)\right] \quad (2.49)$$

Novamente, o lema anterior (2.1) nos diz que a série

$$\Phi_{\gamma_0}^{b^{KP}}(r) = \sum_{t \in \mathcal{T}^0} \prod_{v \geq 0} \left\{ \sum_{(\gamma_{v1}, \dots, \gamma_{vs_v}) \in \mathcal{P}^{s_v}} \frac{1}{s_i!} \prod_{i=1}^{s_v} \mathbb{1}_{\{\gamma_v \approx \gamma_{vi}\}} r(\gamma_{v1}) \cdots r(\gamma_{vs_v}) \right\} \quad (2.50)$$

converge para todo $\rho \leq r$. Comparando (2.24) e (2.50) temos:

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

Então, chegamos ao critério de Kotecký e Preiss, a saber:

Corolário 2.2 (Kotecký-Preiss). Escolha $\mu \in (0, +\infty)^{\mathcal{P}}$ e considere $r^{KP} \in (0, +\infty)^{\mathcal{P}}$ definido por:

$$r_{\gamma_0}^{KP} = \frac{\mu(\gamma_0)}{\exp\left[\sum_{\gamma \approx \gamma_0} \mu(\gamma)\right]} \quad (2.51)$$

Seja $\rho \in (0, +\infty)^{\mathcal{P}}$ tal que

$$\rho \leq r_{\gamma}^{KP} = \frac{\mu(\gamma)}{\exp\left[\sum_{\tilde{\gamma} \approx \gamma} \mu(\tilde{\gamma})\right]} \quad (2.52)$$

Então a série $|\Pi|_{\gamma_0}(\rho)$ definida em (2.12) é finita para todo $\gamma_0 \in \mathcal{P}$ e

$$|\Pi|_{\gamma}(\rho) \leq \exp\left[\sum_{\tilde{\gamma} \approx \gamma} \mu(\tilde{\gamma})\right] \quad (2.53)$$

ou

$$\rho(\gamma) |\Pi|_{\gamma}(\rho) \leq \mu(\gamma), \quad \forall \gamma \in \mathcal{P} \quad (2.54)$$

Em suma, os três critérios apresentados são da forma

$$\rho(\gamma) \leq r(\gamma) = \frac{\mu(\gamma)}{\varphi_\gamma(\mu)} \quad (2.55)$$

com

$$\varphi_\gamma(\rho) = \begin{cases} \exp[\sum_{\tilde{\gamma} \sim \gamma} \mu(\tilde{\gamma})] & \text{(Kotecký-Preiss)} \\ \prod_{\tilde{\gamma} \sim \gamma} (1 + \mu(\tilde{\gamma})) & \text{(Dobrushin)} \\ \Xi_{\mathcal{P}_\gamma}(\mu) & \text{(Fernández-Procacci)} \end{cases} \quad (2.56)$$

Além disso, para todo $\mu \in (0, +\infty)^{\mathcal{P}}$, temos:

$$\Xi_{\mathcal{P}_\gamma}(\mu) \leq \prod_{\tilde{\gamma} \sim \gamma} (1 + \mu(\tilde{\gamma})) \leq \exp[\sum_{\tilde{\gamma} \sim \gamma} \mu(\tilde{\gamma})]$$

Isto implica que:

$$r_\gamma^* \geq r_\gamma^{Dob} \geq r_\gamma^{KP}$$

Portanto, o critério dado pelo Teorema (2.1) dá a melhor estimativa do raio de convergência para a cluster expansions entre os três propostos.

Exemplos elementares

Daremos aqui exemplos de como o critério (2.40) melhora o raio de convergência em algumas aplicações.

Exemplo 1. O modelo Dominó em \mathbb{Z}^2 :

Aqui, os elementos dos espaço de polímeros \mathcal{P} são os elos da rede cúbica bidimensional. Para cada $\gamma \in \mathcal{P}$ colocamos $\rho(\gamma) = \varepsilon$, onde $\varepsilon > 0$. Dois polímeros são incompatíveis se, e somente se, eles não possuem interseção vazia. Assumimos por simetria, que as funções $\mu(\gamma)$ que aparecem nos critérios de Kotecký-Preiss e Dobrushin são constantes no valor μ , isto é, $\mu(\gamma) = \mu$.

O critério de Kotecký-Preiss (2.52) aplicado ao modelo dominó resulta em:

$$\rho(\gamma) \leq \mu(\gamma) e^{-\sum_{\tilde{\gamma} \sim \gamma} \mu(\tilde{\gamma})} \iff \varepsilon \leq \mu e^{-7\mu}$$

cujo valor máximo é:

$$\varepsilon \leq \frac{1}{7e} \approx 0.0525$$

Por outro lado, pela condição de Dobrushin temos:

$$\rho(\gamma) \leq \frac{\mu(\gamma)}{\prod_{\tilde{\gamma} \sim \gamma} \mu(\tilde{\gamma})} \iff \varepsilon \leq \frac{\mu}{(1 + \mu)^7} \quad (2.57)$$

cujo valor máximo é:

$$\varepsilon \leq \frac{\frac{1}{6}}{(1 + \frac{1}{6})^7} \approx 0.0566$$

Finalmente, a condição de Fernández-Procacci (2.40) nos dá:

$$\rho(\gamma) \leq \frac{\mu(\gamma)}{\Xi_{\mathcal{P}_\gamma}(\mu)} \iff \varepsilon \leq \frac{\mu}{1 + 7\mu + 9\mu^2} \quad (2.58)$$

cujo valor máximo é:

$$\varepsilon \leq \frac{1}{13} \approx 0.0769 \quad (2.59)$$

Exemplo 2. O lattice gas sobre um grafo de grau limitado $\mathbb{G} = (\mathbb{V}, \mathbb{E})$ com auto-repulsão hard core e interação em pares hard core

Seja $\mathbb{G} = (\mathbb{V}, \mathbb{E})$ um grafo infinito de grau limitado com conjunto de vértices \mathbb{V} e conjunto de elos \mathbb{E} , e grau máximo Δ . O sistema de polímeros é obtido pela escolha $\mathcal{P} = \mathbb{V}$ e definindo a relação de incompatibilidade \approx dizemos que dois polímeros γ' e γ (isto é, dois vértices de \mathbb{G}) são incompatíveis se, e somente se, $\gamma' = \gamma$ ou $\{\gamma', \gamma\} \in \mathbb{E}$. Este gás de polímeros é chamado de lattice gas hard core auto-repulsivo sobre \mathbb{G} . Em geral, uma vez que os polímeros não possuem estrutura (são apenas os vértices de um grafo) podemos supor que a atividade de cada polímero $x \in \mathcal{P}$ é uma constante, isto é, $\rho_x = \rho$, $\forall x \in \mathcal{P}$. Obviamente, esperamos que o raio de convergência dependa forte da estrutura topológica de \mathbb{G} . Consideraremos o pior caso, a saber, quando o grafo \mathbb{G} é tal que os primeiros vizinhos de qualquer vértice são compatíveis par a par. Isto acontece, por exemplo, quando o grafo é uma árvore ou rede cúbica \mathbb{Z}^d .

A condição de Kotecký-Preiss (2.52) para este modelo nos diz que:

$$\rho_x \leq \mu(x)e^{-\sum_{y \approx x} \mu(y)} \iff \rho \leq \mu e^{-(\Delta+1)\mu}$$

cujo valor valor máximo é:

$$\rho \leq \frac{1}{(\Delta + 1)e}$$

Por outro lado, a condição de Dobrushin (2.46) dá

$$\rho_x \leq \frac{\mu(x)}{\prod_{y \approx x} [1 + \mu(y)]} \iff \rho \leq \frac{\mu}{(1 + \mu)^{\Delta+1}}$$

cujo valor máximo é:

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

Finalmente, a critério de Fernández-Procacci (2.40) nos diz que;

$$\rho_x \leq \frac{\mu(x)}{\Xi_{\mathcal{P}_\gamma}(\mu)} \iff \rho \leq \frac{\mu}{1 + (\Delta + 1)\mu + \sum_{k=2}^{\Delta} \binom{\Delta}{k} \mu^k} = \frac{\mu}{\mu + (1 + \mu)^\Delta} \quad (2.60)$$

cujo valor máximo é:

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

Capítulo 3

Gás de subconjuntos finitos não-sobrepostos de um conjunto enumerável

Agora estudaremos um caso particular do gás de polímeros que aparece na maior parte dos exemplos em mecânica estatística.

Vamos supor que é dado um conjunto infinito enumerável \mathbb{V} , e definimos o espaço de polímeros como:

$$\mathcal{P}_{\mathbb{V}} = \{R \subset \mathbb{V} : |R| < \infty\}$$

e a relação de incompatibilidade em $\mathcal{P}_{\mathbb{V}}$ é definida por:

$$\gamma \approx \gamma' \iff \gamma \cap \gamma' \neq \emptyset$$

Note que agora os polímeros possuem um certa cardinalidade $|\gamma|$, de modo que podemos falar sobre polímeros grandes ou pequenos. Como antes, associamos a cada polímero γ uma atividade $\rho(\gamma) \in [0, \infty)$. Aqui, permitiremos que $\rho(\gamma) = 0$ para algum γ de maneira a ficar mais geral. Por exemplo, na expansão de polímeros de alta temperatura para sistemas de spins, é sempre $\mathcal{P}_{\mathbb{V}}$ para o conjunto mais apropriado \mathbb{V} e $\rho(\gamma) = 0$ sempre que $|\gamma| = 1$.

Agora, considere Λ um subconjunto finito de \mathbb{V} . Uma configuração do gás de polímeros em Λ é dada quando especificamos o conjunto dos polímeros que estão presentes em Λ . Obviamente, estes polímeros devem ser par a par compatíveis, isto é, 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 $i, j \in \{1, 2, \dots, n\}$. A probabilidade de se encontrar a configuração $\{\gamma_1, \dots, \gamma_n\}$ na caixa Λ é definida como:

$$Prob_\gamma(\gamma_1, \dots, \gamma_n) = \Xi_\Lambda^{-1} \prod_{i=1}^n \rho(\gamma_i)$$

onde Ξ_Λ é a função de partição dada por:

$$\Xi_\Lambda(\rho) = 1 + \sum_{n \geq 1} \sum_{\substack{(\gamma_1, \dots, \gamma_n): \gamma_i \subset \Lambda \\ \gamma_i \cap \gamma_j = \emptyset}} \rho(\gamma_1) \cdots \rho(\gamma_n) \quad (3.1)$$

3.1 Convergência via os critérios dos polímeros abstratos

Vamos comparar os três critérios de convergência obtidos em (2.40),(2.46) e (2.52) para este modelo.

Começamos com o critério de Kotecký-Preiss, escolhendo $\mu(\gamma) = \rho_\gamma e^{a|\gamma|}$ onde $a > 0$, a condição (2.52) torna-se:

$$\sum_{\substack{\bar{\gamma} \in \mathcal{P}_V \\ \bar{\gamma} \approx \gamma}} \rho_{\bar{\gamma}} e^{a|\bar{\gamma}|} \leq a|\gamma|, \quad \forall \gamma \in \mathcal{P} \quad (3.2)$$

Usando o fato que $\bar{\gamma} \approx \gamma$ significa $\bar{\gamma} \cap \gamma \neq \emptyset$, temos:

$$\sum_{\substack{\bar{\gamma} \in \mathcal{P}_V \\ \bar{\gamma} \approx \gamma}} \rho_{\bar{\gamma}} e^{a|\bar{\gamma}|} \leq |\gamma| \sup_{x \in \bar{\gamma}} \sum_{x \in \bar{\gamma}} \rho_{\bar{\gamma}} e^{a|\bar{\gamma}|}$$

Portanto, (3.2) torna-se a seguinte condição:

$$\sup_{x \in \bar{\gamma}} \sum_{\substack{\gamma \in \mathcal{P}_V \\ x \in \gamma}} |\rho_\gamma| e^{a|\gamma|} \leq a \quad (3.3)$$

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

$$\rho_\gamma \leq \frac{\mu(\gamma)}{\prod_{\gamma \in \mathcal{P}_V: \bar{\gamma} \approx \gamma} [1 + \mu(\bar{\gamma})]} \quad (3.4)$$

escolhendo novamente $\mu(\gamma) = \rho_\gamma e^{a|\gamma|}$ a condição acima fica:

$$\prod_{\substack{\bar{\gamma} \in \mathcal{P}_V \\ \bar{\gamma} \approx \gamma}} (1 + \rho_{\bar{\gamma}} e^{a|\bar{\gamma}|}) \leq e^{a|\gamma|}, \quad \forall \gamma \in \mathcal{P} \quad (3.5)$$

isto é,

$$\sum_{\substack{\bar{\gamma} \in \mathcal{P}_V \\ \bar{\gamma} \approx \gamma}} \log(1 + |\rho_{\bar{\gamma}}| e^{a|\bar{\gamma}|}) \leq a|\gamma|, \quad \forall \gamma \in \mathcal{P} \quad (3.6)$$

e

$$\sup_{x \in \mathbb{V}} \sum_{\substack{\gamma \in \mathcal{P}_{\mathbb{V}} \\ x \in \gamma}} \log(1 + |\rho_{\gamma}| e^{a|\gamma|}) \leq a \quad (3.7)$$

que um pouco melhor que (3.2).

Finalmente, a condição (2.40), colocando novamente $\mu(\gamma) = |\rho_{\gamma}| e^{a|\gamma|}$, torna-se:

$$\Xi_{\mathcal{P}_{\mathbb{V}}}^{\gamma}(\mu) \leq e^{a|\gamma|} \quad (3.8)$$

onde

$$\Xi_{\mathcal{P}_{\mathbb{V}}}^{\gamma}(\mu) = 1 + \sum_{n=1}^{|\Lambda|} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}_{\mathbb{V}}^n \\ \gamma \sim \gamma_i, \gamma_i \sim \gamma_j}} \prod_{i=1}^n |\rho_{\gamma_i}| e^{a|\gamma_i|} \quad (3.9)$$

Novamente, usaremos o fato que $\gamma \sim \gamma' \iff \gamma \cap \gamma' \neq \emptyset$ para estimar o fator:

$$\sum_{\substack{(\gamma_1, \dots, \gamma_n) \in \mathcal{P}_{\mathbb{V}}^n \\ \gamma \sim \gamma_i, \gamma_i \sim \gamma_j}} \prod_{i=1}^n |\rho_{\gamma_i}| e^{a|\gamma_i|} \quad (3.10)$$

Observe que este fator é zero sempre que $n > |\gamma|$, uma vez que não podemos escolher n subconjuntos γ_i de \mathbb{V} todos compatíveis entre si e incompatíveis com um subconjunto fixado $\gamma \in \mathbb{V}$. Por outro lado, para $n \leq |\gamma|$, podemos limitar o fator acima por:

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

Deste modo,

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

Assim, (3.8) pode ser escrito como:

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

isto é,

$$\sup_{x \in \mathbb{V}} \sum_{\substack{\gamma \in \mathcal{P}_{\mathbb{V}} \\ x \in \gamma}} |\rho_{\gamma}| e^{a|\gamma|} \leq e^a - 1 \quad (3.11)$$

3.2 Exemplo: Modelo BEG

O modelo devido à Blume-Emery-Griffiths, conhecido abreviadamente como modelo BEG, é um modelo de spin-um originalmente proposto em [1] no contexto da superfluidez para o modelo de separação de fase em misturas de Hélio. Desde então, tem sido intensivamente investigado devido a seu rico diagrama de fase e pode ser considerado o modelo básico para sistemas em que as transições de fase podem ser excitadas pela quebra de simetria ou flutuações de densidade.

O modelo BEG, é definido na rede cúbica d -dimensional \mathbb{Z}^d associando à cada vértice $x \in \mathbb{Z}^d$ uma variável aleatória σ_x (*spin*) tomando valores no conjunto $\{-1, 0, 1\}$.

Uma configuração σ de \mathbb{Z}^d será dada quando especificarmos o valor de $\sigma_x, \forall x \in \mathbb{Z}^d$. Estes spins interagem via um Hamiltoniano dado por :

$$H = - \sum_{\{x,y\} \subset \mathbb{Z}^d} [J_{xy} \sigma_x \sigma_y + K_{xy} \sigma_x^2 \sigma_y^2] + D \sum_{x \in \mathbb{Z}^d} \sigma_x^2 \quad (3.12)$$

onde $J_{xy} \geq 0$ e $K_{xy} \in \mathbb{R}$ são interações somáveis e definimos

$$J = \frac{1}{2} \sup_{x \in \mathbb{Z}^d} \sum_{y \in \mathbb{Z}^d, y \neq x} (J_{xy} + |K_{xy}|) \quad (3.13)$$

Consideraremos a região em que $D > J$ chamada de fase desordenada.

A função de partição no Grand Canonical Ensemble deste gás de lattice restrito a um subconjunto $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ será dada por:

$$Z_{\Lambda}(\beta) = \sum_{n=0}^{|\Lambda|} e^{-\beta H_{\Lambda}(\sigma)} \quad (3.14)$$

agora,

$$H_{\Lambda}(\sigma) = - \sum_{\{x,y\} \in \Lambda} [J_{xy} \sigma_x \sigma_y + K_{xy} \sigma_x^2 \sigma_y^2] + D \sum_{x \in \Lambda} \sigma_x^2 \quad (3.15)$$

Substituindo (3.15) em (3.14), obtemos:

$$Z_\Lambda(\beta) = \sum_{\sigma_\Lambda} e^{-\beta D \sum_{x \in \Lambda} \sigma_x^2} \exp \left\{ -\beta \sum_{\{x,y\} \in \Lambda} \sigma_x \sigma_y F_{xy} \right\} \quad (3.16)$$

onde reorganizamos a soma sobre o número de partículas como soma sobre configurações em Λ , sendo:

$$F_{xy} \equiv -J_{xy} - \sigma_x \sigma_y K_{xy} \quad (3.17)$$

Agora,

$$\begin{aligned} e^{-\beta \sum_{\{x,y\} \in \Lambda} \sigma_x \sigma_y F_{xy}} &= \prod_{\{x,y\} \subset \Lambda} [e^{-\beta \sum_{\{x,y\} \in \Lambda} \sigma_x \sigma_y F_{xy}} + 1 - 1] \\ &= \sum_{\{R_1, \dots, R_s\} \in \Pi(\Lambda)} \rho(R_1) \cdots \rho(R_s) \end{aligned} \quad (3.18)$$

onde $\Pi(\Lambda)$ é o conjunto de todas as partições de Λ e

$$\rho(R) = \begin{cases} 1, & \text{se } |R| = 1 \\ \sum_{g \in G_R} \prod_{\{x,y\} \in g} [e^{-\beta \sigma_x \sigma_y F_{xy}} - 1], & \text{se } |R| \geq 2 \end{cases} \quad (3.19)$$

G_R é o conjunto de todos os grafos conexos com vértices em R .

Então,

$$Z_\Lambda(\beta) = \sum_{\sigma_\Lambda} e^{-\beta D \sum_{x \in \Lambda} \sigma_x^2} \sum_{\{R_1, \dots, R_s\} \in \Pi(\Lambda)} \rho(R_1) \cdots \rho(R_s) \quad (3.20)$$

Uma partição $\{R_1, \dots, R_s\}$ de Λ induz uma partição de σ_Λ , a saber, $\{\sigma_{R_1}, \dots, \sigma_{R_s}\}$. Assim:

$$Z_\Lambda(\beta) = \sum_{\{R_1, \dots, R_s\} \in \Pi(\Lambda)} \left[\sum_{\sigma_{R_1}} \rho(R_1) e^{-\beta D \sum_{x \in R_1} \sigma_x^2} \right] \cdots \left[\sum_{\sigma_{R_s}} \rho(R_s) e^{-\beta D \sum_{x \in R_s} \sigma_x^2} \right] \quad (3.21)$$

Observe que para todo $g \in G_R$,

$$\prod_{\{x,y\} \in g} [e^{-\beta \sigma_x \sigma_y F_{xy}} - 1] = 0$$

sempre que existe $x \in g$ tal que $\sigma_x = 0$. Assim, podemos somar somente sobre os $g's \in G_R$ tais que os todos os seus vértices x possuem a propriedade que $\sigma_x \neq 0, \forall x \in g$.

Daí, $\sum_{x \in R} \sigma_x^2 = |R|$ e chamando $\bar{\rho}(R) = \sum_{\sigma_R} \rho(R) e^{-\beta D \sum_{x \in R} \sigma_x^2}$ segue que:

$$\bar{\rho}(R) = \begin{cases} 1 + 2e^{-\beta D}, & \text{se } |R| = 1 \\ e^{\beta D |R|} \sum_{\sigma_R} \sum_{g \in G_R} \prod_{\{x,y\} \in g} [e^{-\beta \sigma_x \sigma_y F_{xy}} - 1], & \text{se } |R| \geq 2 \end{cases} \quad (3.22)$$

Por outro lado, se definirmos:

$$\zeta(R) = \begin{cases} 1, & \text{se } |R| = 1 \\ \frac{e^{-\beta D|R|}}{(1+2e^{-\beta D})^{|R|}} \sum_{\sigma_R} \sum_{g \in G_R} \prod_{\{x,y\} \in g} [e^{-\beta \sigma_x \sigma_y F_{xy}} - 1], & \text{se } |R| \geq 2 \end{cases} \quad (3.23)$$

Então,

$$Z_\Lambda(\beta) = (1 + 2e^{-\beta D})^{|\Lambda|} \sum_{\{R_1, \dots, R_s\} \in \Pi(\Lambda)} \zeta(R_1) \dots \zeta(R_s) \quad (3.24)$$

Mas,

$$\begin{aligned} \Xi_\Lambda(\beta) &\equiv \sum_{\{R_1, \dots, R_s\} \in \Pi(\Lambda)} \zeta(R_1) \dots \zeta(R_s) \\ &= \sum_{n \geq 1} \sum_{\{R_1, \dots, R_s\} \in \Pi(\Lambda)} \zeta(R_1) \dots \zeta(R_s) = \\ &= 1 + \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{(R_1, \dots, R_s) \in \Pi(\Lambda) \\ |R_i| \geq 2 \quad R_i \cap R_j = \emptyset}} \zeta(R_1) \dots \zeta(R_s) \end{aligned} \quad (3.25)$$

A função $\Xi_\Lambda(\beta)$ em (3.25) agora pode ser interpretada como a função de partição de um gás de polímeros abstrato interagindo via um potencial hard core. Para tanto, definimos a seguinte relação de incompatibilidade \sim no conjunto $\mathcal{P}_V = \{R \in \mathbb{Z}^d : |R| \geq 2\}$ (conjunto dos polímeros):

$$R \sim R' \Leftrightarrow R \cap R' = \emptyset \quad (3.26)$$

Assim,

$$\Xi_\Lambda(\beta) = 1 + \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \sum_{\substack{(R_1, \dots, R_s) \in \mathcal{P}_V^n \\ R_i \sim R_j}} \zeta(R_1) \dots \zeta(R_s) \quad (3.27)$$

Portanto, a energia livre de Gibbs do modelo BEG é uniformemente analítica em Λ , se $\Xi_\Lambda(\beta)$ o é.

Pela condição de Fernández-Procacci (3.11), temos:

$$\sup_{x \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\substack{R \in \mathbb{Z}^d \\ x \in R}} |\zeta(R)| e^{a|R|} \leq e^a - 1 \quad (3.28)$$

Mas,

$$\sup_{x \in \mathbb{Z}^d} \sum_{n \geq 2} \sum_{\substack{R \in \mathbb{Z}^d \\ x \in R \\ |R|=n}} |\zeta(R)| e^{an} = \sum_{n \geq 2} e^{an} \sup_{x \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\substack{R \in \mathbb{Z}^d \\ x \in R \\ |R|=n}} |\zeta(R)| \quad (3.29)$$

Agora, de (3.23) em (3.29) vem:

$$\sup_{x \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\substack{R \in \mathbb{Z}^d \\ x \in R \\ |R|=n}} |\zeta(R)| = \left(\frac{e^{-\beta D}}{1 + 2e^{-\beta D}} \right)^n \sup_{x \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\substack{R \in \mathbb{Z}^d \\ x \in R \\ |R|=n}} \left| \sum_{\sigma_R} \sum_{g \in G_R} \prod_{\{x,y\} \in g} [e^{-\beta \sigma_x \sigma_y F_{xy}} - 1] \right| \quad (3.30)$$

Considerando o potencial dado por $V_{xy} = \sigma_x \sigma_y F_{xy}$, onde $F_{xy} = -J_{xy} - K_{xy} \sigma_x \sigma_y$ juntamente com (3.13) temos:

$$\sum_{1 \leq i < j \leq n} V_{ij} \geq -\frac{1}{2} \sum_{i \in \Lambda} \sum_{\substack{j \in \Lambda \\ j \neq i}} |V_{ij}| \quad (3.31)$$

como $|V_{ij}| \leq J_{ij} + |K_{ij}|$

$$\sum_{\{i,j\}} V_{ij} \geq -\frac{1}{2} \sum_{i \in \Lambda} \sum_{\substack{j \in \Lambda \\ j \neq i}} |V_{ij}| \geq -\sum_{i=1}^n \beta J = -nJ\beta \quad (3.32)$$

e o potencial V_{xy} é estável.

Pelo Corolário 1.3 da identidade grafo-árvore de Brydges, a saber,

$$\left| \sum_{g \in G_R} \prod_{\{i,j\} \in g} [e^{-V_{ij}-1}] \right| \leq e^{-\sum_{i=1}^n B(i)} \sum_{\tau \in T_n} \prod_{\{i,j\} \in \tau} |V_{ij}| \quad (3.33)$$

onde, $B = \max_{1 \leq i < j \leq n} B_i = J\beta$.

De (3.33) em (3.30), temos:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{e^{-\beta D}}{1 + 2e^{-\beta D}} \right)^n \sup_{x \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\substack{R \in \mathbb{Z}^d \\ x \in R \\ |R|=n}} \left| \sum_{\sigma_R} \sum_{g \in G_R} \prod_{\{x,y\} \in g} [e^{-\beta \sigma_x \sigma_y F_{xy}} - 1] \right| = \\ & \left(\frac{e^{-\beta D}}{1 + 2e^{-\beta D}} \right)^n \frac{n}{n!} \sup_{x \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\substack{(x_1, \dots, x_n) \in (\mathbb{Z}^d)^n \\ x_1 = x \\ x_i \neq x_j}} \left| \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \dots \sum_{\sigma_n = \pm 1} \sum_{g \in G_R} \prod_{\{x,y\} \in g} [e^{-\beta \sigma_x \sigma_y F_{xy}} - 1] \right| \leq \\ & \left(\frac{e^{-\beta D}}{1 + 2e^{-\beta D}} \right)^n \frac{n}{n!} \sup_{x \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\substack{(x_1, \dots, x_n) \in (\mathbb{Z}^d)^n \\ x_1 = x \\ x_i \neq x_j}} e^{Bn} \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \dots \sum_{\sigma_n = \pm 1} \sum_{\tau \in T_n} \prod_{\{x,y\} \in \tau} [\beta F_{xy}] \leq \\ & \left[\frac{e^{\beta(J-D)}}{(1 + 2e^{-\beta D})} \right]^n \frac{(\beta)^{n-1}}{(n-1)!} \sum_{\tau \in T_n} \sup_{x \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\substack{(x_1, \dots, x_n) \in \Lambda^n \\ x_1 = x \\ x_i \neq x_j}} \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \dots \sum_{\sigma_n = \pm 1} \prod_{\{i,j\} \in \tau} |F_{x_i x_j}| \end{aligned}$$

Mas,

$$\sum_{\substack{(x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{Z}^d \\ x_1 = x \\ x_i \neq x_j}} \prod_{\{i,j\} \in \tau} |F_{x_i x_j}| \leq \sum_{\substack{x_2 \in \mathbb{Z}^d \\ x_2 \neq x}} \sum_{\substack{x_3 \in \mathbb{Z}^d \\ x_3 \neq x_2}} \dots \sum_{\substack{x_n \in \mathbb{Z}^d \\ x_n \neq x_{n-1}}} \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \dots \sum_{\sigma_n = \pm 1} \prod_{\{i,j\} \in \tau} |F_{x_i x_j}| \quad (3.34)$$

Pois nos somatórios acima, no primeiro $x_1 = x$ e os demais são menos restritivos que os demais. É fácil mostrar que: $\sup_{x \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\substack{y \in \mathbb{Z}^d \\ y \neq x}} |F_{xy}| = 2J$.

Pela observação anterior,

$$\begin{aligned}
& \sum_{\substack{x_2 \in \mathbb{Z}^d \\ x_2 \neq x}} \sum_{\substack{x_3 \in \mathbb{Z}^d \\ x_3 \neq x_2}} \cdots \sum_{\substack{x_n \in \mathbb{Z}^d \\ x_n \neq x_{n-1}}} \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \cdots \sum_{\sigma_n = \pm 1} \prod_{\{i,j\} \in \tau} |F_{x_i x_j}| \leq \\
& \sup_{x \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\substack{x_2 \in \mathbb{Z}^d \\ x_2 \neq x}} \sup_{x_2 \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\substack{x_3 \in \mathbb{Z}^d \\ x_3 \neq x_2}} \cdots \sup_{x_{n-1} \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\substack{x_n \in \mathbb{Z}^d \\ x_n \neq x_{n-1}}} \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \cdots \sum_{\sigma_n = \pm 1} \prod_{\{i,j\} \in \tau} |F_{x_i x_j}| \leq \\
& 2^n (2J)^{n-1} \tag{3.35}
\end{aligned}$$

Finalmente,

$$\begin{aligned}
& \sum_{n \geq 2} e^{an} \sup_{x \in \mathbb{Z}^d} \sum_{\substack{R \in \mathbb{Z}^d \\ x \in R \\ |R|=n}} |\zeta(R)| \leq \\
& \sum_{n \geq 2} e^{an} \left[\frac{2e^{\beta(J-D)}}{1 + 2e^{-\beta D}} \right]^n \frac{(2\beta J)^{n-1}}{(n-1)!} \sum_{\tau \in T_n} 1 = \\
& \sum_{n \geq 2} e^{an} \left[\frac{2e^{\beta(J-D)}}{1 + 2e^{-\beta D}} \right]^n \frac{(2\beta J)^{n-1} n^{n-2}}{(n-1)!} = \\
& \sum_{n \geq 2} e^{an} (2\lambda_\beta)^n (2\beta J)^{n-1} \frac{n^{n-1}}{n!} \tag{3.36}
\end{aligned}$$

onde:

$$\lambda_\beta = \frac{e^{\beta(J-D)}}{1 + 2e^{-\beta D}}$$

E o critério torna-se:

$$\sum_{n \geq 2} e^{an} (2\lambda_\beta)^n (2\beta J)^{n-1} \frac{n^{n-1}}{n!} \leq e^a - 1$$

isto é,

$$(e^a - 1)^{-1} \sum_{n=2}^{+\infty} e^{an} [4\lambda_\beta \beta J]^{n-1} \frac{n^{n-1}}{n!} \leq \frac{1}{2\lambda_\beta} \tag{3.37}$$

Pelo Lema 6.1 de [5], a convergência ocorre se:

$$\frac{4}{\frac{1}{2\lambda_\beta}} + 3 \leq \frac{1}{4\lambda_\beta \beta J}$$

isto é, se:

$$4\beta J \leq \frac{1}{\lambda_\beta} \left[\frac{1}{8\lambda_\beta + 3} \right]$$

Isto pode ser colocado da seguinte forma:

$$4\beta J \leq \frac{e^{\beta(D-J)}}{[8\lambda_\beta + 3] \kappa_\beta} \tag{3.38}$$

onde:

$$\kappa_\beta = \frac{1}{(1 + 2e^{-\beta D})}$$

A desigualdade acima é em geral satisfeita quando $\beta \leq \beta_1(D, J)$ ou $\beta \geq \beta_2(D, J)$. Isto pode ser visto considerando a função

$$F(\beta) = \frac{e^{\beta(D-J)}}{[8\lambda_\beta + 3]\kappa_\beta}$$

Note que a função acima é assintótica a $\frac{1}{3}e^{\beta(D-J)}$ de maneira que para β suficientemente grande, digamos $\beta \geq \beta_2$ a desigualdade (3.38) é satisfeita para todo D, J tal que $D > J$. Por outro lado, $F(0) = \frac{9}{17}$, de modo que para β suficientemente pequeno, $\beta \leq \beta_1$, a desigualdade (3.38) é também satisfeita. É claro que quando D torna-se cada vez maior que J a região em que (3.38) é satisfeita, aumenta. Isto é, β_1 cresce e β_2 decresce.

Observe que para valores $D - J$ suficientemente pequenos a desigualdade (3.38) não é satisfeita para alguns valores de β (no intervalo (β_1, β_2)). Como exemplo, suponhamos que $D = 3J$. Neste caso, (3.38) torna-se:

$$\frac{e^{\frac{2}{3}\beta D}(1 + 2e^{-\beta D})^2}{8e^{\frac{2}{3}\beta D} + 3 + 6e^{-\beta D}} \geq \frac{4}{3}\beta D$$

que não é satisfeita se $\beta = \frac{1}{D}$.

Esta situação claramente indica que existe um valor crítico de D , que denotaremos por $D_c(J)$, tal que se $D > D_c$ então a desigualdade (3.38) é sempre satisfeita para qualquer $\beta \in [0, \infty)$. Ou seja, acima deste valor do campo de cristal não existe transição de fase para qualquer temperatura. Vamos calcular uma cota superior para o valor crítico do campo de cristal D_c . As estimativas não serão as mais precisas possíveis.

Em primeiro lugar, podemos assumir que $D > 3J$, que é um valor para o qual seguramente existe β não satisfazendo (3.38). Se $D > 3J$, é fácil mostrar que $[8\lambda_\beta + 3]\kappa_\beta \leq 11$

Deste modo, (3.38) é certamente satisfeita se:

$$44\beta J \leq e^{\beta(D-J)}$$

Para tanto, basta observar que o mínimo da função

$$f(\beta) = e^{\beta(D-J)} - 44\beta J$$

ocorre quando

$$(D - J)e^{\beta(D-J)} = 44J \tag{3.39}$$

Se β_c é a solução da equação acima, temos:

$$f(\beta_c) = 44J \left(\frac{1}{D - J} - \beta_c \right)$$

e impondo

$$f(\beta_c) = 0$$

conseguimos

$$\frac{1}{D - J} = \beta_c$$

que substituído em (3.39) dá:

$$\ln \left[\frac{44J}{(D - J)} \right] = 1$$

Isto implica que:

$$D_c = \left(1 + \frac{44}{e} \right) J \tag{3.40}$$

Segue então o seguinte teorema:

Teorema 3.1. *Considere o modelo BEG com Hamiltoniano definido em (3.12). Se $D \geq \left(1 + \frac{44}{e} \right) J$, onde J é a constante dada por (3.13), então o modelo BEG não apresenta transição de fase para qualquer temperatura.*

Referências Bibliográficas

- [1] Blume, M; Emery, V.J.; Griffiths, Robert B: *Ising Model for the λ transition and phase separation em $He^3 - He^4$ mixtures*. Phys. Rev A, Volume 4, Número 3, 1071-1077 (1971)
- [2] Brydges, D.C: *A short course in cluster expansion*. Em: Critical Phenomena, Random Systems, Gauges Theories. Amsterdam: Elsevier, 1984
- [3] Fernández, R ; Procacci, A: *Cluster expansion for abstract polymer models. New bounds from an old approach*. Commun. Math, Phys. **274**, 123 -140 (2007)
- [4] Gruber, C; Kunz, H: *General properties of polymer systems*. Commun. Math. Phys. **22**, 133 - 61 (1971)
- [5] Jackson, B; Procacci, A; Sokal, A.D: *Complex zero-free regions at large $|q|$ for multivariate Tutte polynomials (alias Potts-model partition functions) with general complex edge weights*. math.CO/0810.4703v1 em arXiv.org (2008)
- [6] Kotecký, R; Preiss, D: *Cluster expansion for abstract polymer models*. Commun. Math. Phys. **103**, 491 - 498 (1986)
- [7] Penrose, O: *Convergence of fugacity expansions for classical systems*. Em: Statistical Mechanics: foundations and applications. New York: Benjamin, 1967
- [8] Procacci, A: *Cluster expansion methods in rigorous statistical mechanics*. Em construção.
- [9] Procacci, A; Scoppola, B: *Polymer gas approach to N - body lattice systems*. J. Statist. Phys. **96**, 49 - 68 (1999)
- [10] Ruelle, D: *Statistical mechanics: Rigorous results*. New York - Amsterdam: W. A. Benjamin, Inc., 1969