



Universidade de Brasília
Instituto de Ciências Exatas
Departamento de Matemática

Transição de Fase Difusiva-Balística em Polímeros Aleatórios

por

Simone Vasconcelos da Silva

Orientador: Leandro Martins Cioletti

Brasília
2014

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos professores Leandro Cioletti e Chang Dorea, pela orientação, incentivo e confiança na minha capacidade de realizar este feito. Vocês são pessoas que me inspiram profissionalmente.

Agradeço aos professores membros da banca examinadora, pelo paciente trabalho de revisão e sugestões para pesquisas futuras, à Universidade de Brasília, seu corpo docente, direção e administração, por fornecer a estrutura acadêmica necessária e à Universidade Federal de Goiás, pelo apoio na realização do doutorado juntamente com a atividade docente.

Aos amigos, agradeço por poder dividir as alegrias e dificuldades desta experiência. Agradeço aos meus familiares, que me deram toda a estrutura para conseguir realizar este sonho, por entenderem a minha ausência e por se orgulharem deste feito tanto quanto eu. Em especial, agradeço à minha mãe, Maria da Graça, pela confiança e amor incondicional.

Agradeço ao Fernando[♥], que durante este processo foi namorado, noivo e esposo, sempre compreensivo e me incentivando a buscar minhas realizações profissionais, mesmo que para isso tenhamos que ficar fisicamente distantes.

Finalmente, agradeço a Deus, pela presença constante ao meu lado e por me cercar de amor, cuidado e pessoas incríveis.

Esta foi uma jornada longa, mas o aprendizado foi ainda maior.

Obrigada.

Resumo

Neste trabalho, problemas de transição de fase são abordados para polímeros aleatórios em \mathbb{Z}^2 com interações auto-repulsivas de longo alcance. Na ausência de drift e com interações com decaimento polinomial, o polímero exibe transição de um comportamento difusivo para balístico. Quando drifts não-nulos são adicionados e interações positivas e invariantes por translação são consideradas, o polímero apresenta um comportamento balístico.

Nossos resultados complementam alguns estudos anteriores sobre o assunto e também obtivemos um Teorema do Limite Central para o modelo.

Palavras-chave: polímeros aleatórios auto-repulsivos; modelo de Ising; interações de longo-alcance; transição de fase difusiva-balística; Teorema do Limite Central.

Abstract

In this Ph.D. dissertation phase transition issues are addressed for random polymers on \mathbb{Z}^2 with long-range self-repulsive interactions. It is shown that, in the absence of drift and with power law interactions, the polymer exhibits transition from diffusive to a ballistic behavior. When non-null drifts are added and positive translation invariant interactions are considered, the polymer presents a ballistic behavior. Our results complement some previous studies on the matter and we also derive a Central Limit Theorem for the model.

Keywords: self-repelling random polymers; Ising model; long-range interactions; diffusive-ballistic phase transition; Central Limit Theorem.

*Não me envergonho de
mudar de idéia, porque não
me envergonho de pensar.*

Blaise Pascal

Conteúdo

1	O Modelo de Ising Unidimensional	8
1.1	Introdução	8
1.2	O Modelo de Ising Unidimensional	9
1.3	Desigualdades de Momento	13
1.4	Magnetização e Energia Livre	20
1.5	Medida de Gibbs a Volume Infinito	32
1.6	Teorema de Lee-Yang	38
2	Distância Média Quadrática no Modelo de Polímeros	44
2.1	Introdução	44
2.2	O Modelo de Polímeros Aleatórios Bidimensional	45
2.3	Relação entre o Modelo de Ising e o Modelo de Polímeros	49
2.4	Ausência de Transição de Fase	53
2.5	Transição de fase: $h=0$	55
3	Teorema do Limite Central para o Modelo de Polímeros	60
3.1	Introdução	60
3.2	Condição de Regularidade	61
3.3	O Modelo de Polímeros com Condição Externa	62
3.4	Teorema do Limite Central	65

Introdução

Um dos temas comuns da Teoria de Probabilidade e Mecânica Estatística é a descoberta de regularidade em meio ao caos. As leis da Teoria de Probabilidade resumem o comportamento de sistemas estocásticos em termos de alguns parâmetros como, por exemplo, a média e a variância. Em Mecânica Estatística estudam-se propriedades macroscópicas de um sistema de partículas a partir de uma distribuição de probabilidade que é definida a partir das interações entre as partículas que constituem o sistema.

Exemplos de sistemas físicos importantes na área de Mecânica Estatística são os modelos ferromagnéticos e modelos que representam polímeros. Ambos serão explorados neste trabalho.

Um polímero, do ponto de vista químico, é uma molécula constituída por uma grande quantidade de monômeros, unidos através de ligações químicas devido à multivalência dos átomos. Alguns exemplos são proteínas, açúcares, borracha, sequência de DNA entre outros. Em Mecânica Estatística, passeios aleatórios dependentes são denominados polímeros aleatórios, e são representados na rede Euclidiana d -dimensional \mathbb{Z}^d , $d \geq 1$, de forma que podemos pensar nos monômeros como sendo os vértices de um caminho em \mathbb{Z}^d e as ligações químicas sendo os segmentos de reta (de comprimento 1 na métrica Euclideana) paralelos aos eixos coordenados que ligam dois pontos imediatamente próximos.

O assunto principal desta tese é um modelo de polímero na rede bidimensional \mathbb{Z}^2 . Mais precisamente, seja \mathbb{W}_N a coleção de passeios aleatórios conexos de N passos em \mathbb{Z}^2 dada por

$$\mathbb{W}_N := \{S = (S_0, \dots, S_N) : S_i \in \mathbb{Z}^2, S_0 = 0, \|S_{i+1} - S_i\| = 1, \forall i = 1, \dots, N\},$$

sendo $\|\cdot\|$ a norma ℓ^1 . Cada elemento $S \in \mathbb{W}_N$ é chamado de polímero.

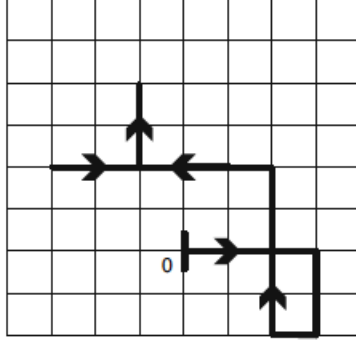


Figura 1: Polímero Aleatório em \mathbb{Z}^2

Note que podemos pensar em um polímero em \mathbb{W}_N como um passeio em \mathbb{Z}^2 de N passos que inicia na origem e termina na posição S_N . A função \mathbb{H}_N , denominada Hamiltoniano, associa uma energia para cada polímero $S \in \mathbb{W}_N$, fornecendo informações de como o polímero interage com o meio e consigo mesmo. Para o nosso modelo,

$$\mathbb{H}_N(S) = - \sum_{1 \leq i < j \leq N} V_{ij} \langle X_i, X_j \rangle - \langle \mathbf{h}, S_N \rangle, \quad (1)$$

onde $X_i = S_i - S_{i-1}$ corresponde ao i -ésimo passo, $\{V_{ij}\}_{i,j=1}^N \subset \mathbb{R}$ são não-negativos denominados *interações*, $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^2$ é um vetor fixado denominado *drift* e $\langle \cdot, \cdot \rangle$ denota o produto interno usual em \mathbb{R}^2 .

Seja β um parâmetro positivo associado ao inverso da temperatura do meio em que o polímero está imerso. A probabilidade de cada $S \in \mathbb{W}_N$ com respeito ao inverso da temperatura β é dada por

$$\mathbb{P}_N^\beta(S) = \frac{\exp[-\beta \mathbb{H}_N(S)]}{\mathbb{Z}_N^\beta}, \quad \text{onde} \quad \mathbb{Z}_N^\beta = \sum_{S \in \mathbb{W}_N} \exp[-\beta \mathbb{H}_N(S)],$$

é denominada *medida de Gibbs* associada ao par $(\mathbb{W}_N, \mathbb{H}_N)$. Devido à questões de estabilidade, os polímeros com mais baixas energias têm maior probabilidade de ocorrência na natureza. Portanto o Hamiltoniano e a medida de Gibbs de um polímero S são inversamente proporcionais.

Já que $V_{ij} \geq 0$ e $\beta > 0$, um polímero S tem maior probabilidade de ocorrer, segundo a medida de Gibbs definida acima, se ele satisfaz $\mathbb{H}_N(S) \leq \mathbb{H}_N(\tilde{S})$, para todo $\tilde{S} \in \mathbb{W}_N$.

Seja $N \in \mathbb{N}$ fixado, e μ_N uma medida de probabilidade em \mathbb{W}_N . Sejam

$$\mu_N(\mathbb{H}_N) = \sum_{S \in \mathbb{W}_N} \mu_N(S) \mathbb{H}_N(S) \quad \text{e} \quad \mathcal{H}(\mu_N) = - \sum_{S \in \mathbb{W}_N} \mu_N(S) \log \mu_N(S),$$

o valor esperado de \mathbb{H}_N (com respeito a μ_N) e a entropia de Shannon de μ_N , respectivamente. Por argumentos simples de convexidade, podemos observar que a entropia de Shannon de uma medida de probabilidade atinge seu valor máximo para medidas de probabilidade que atribuem mesmo peso para todos os pontos do espaço e seu valor mínimo (zero) quando a medida de probabilidade é uma medida tipo Delta concentrada em algum ponto. A medida de Gibbs é a única medida de probabilidade em \mathbb{W}_N que minimiza a diferença $\mu_N(\mathbb{H}_N) - \mathcal{H}(\mu_N)$. Esta minimalidade é precisamente a condição de equilíbrio clássica para um sistema físico, com temperatura constante. O princípio variacional para sistemas finitos afirma que para qualquer medida de probabilidade μ_N em \mathbb{W}_N vale a desigualdade

$$\mu_N(\mathbb{H}_N) - \mathcal{H}(\mu_N) \geq -\log \mathbb{Z}_N,$$

onde $\mathbb{Z}_N = \sum_{S \in \mathbb{W}_N} \exp[-\mathbb{H}_N(S)]$, e a igualdade ocorre somente para a medida de Gibbs $\mathbb{P}_N(S) = (\mathbb{Z}_N)^{-1} \exp[-\mathbb{H}_N(S)]$, $S \in \mathbb{W}_N$. De fato, aplicando a desigualdade de Jensen para a função convexa $\varphi(x) = x \log(x)$, podemos escrever para qualquer μ_N ,

$$\begin{aligned} \mu_N(\mathbb{H}_N) - \mathcal{H}(\mu_N) + \log(\mathbb{Z}_N) &= \sum_{S \in \mathbb{W}_N} \mu_N(S) \left[\mathbb{H}_N(S) + \log(\mu_N(S)) + \log(\mathbb{Z}_N) \right] \\ &= \sum_{S \in \mathbb{W}_N} \mu_N(S) \left[\log(\mu_N(S)) - \log\left(\frac{e^{-\mathbb{H}_N(S)}}{\mathbb{Z}_N}\right) \right] \\ &= \sum_{S \in \mathbb{W}_N} \mu_N(S) \cdot \log[\mu_N(S)/\mathbb{P}_N(S)] \\ &= \sum_{S \in \mathbb{W}_N} \mathbb{P}_N(S) \cdot \varphi(\mu_N(S)/\mathbb{P}_N(S)) \\ &\geq \varphi\left(\sum_{S \in \mathbb{W}_N} \mathbb{P}_N(S) \cdot \mu_N(S)/\mathbb{P}_N(S)\right) \\ &= \varphi(1) = 0. \end{aligned}$$

Como φ é estritamente convexa, a igualdade é válida se, e somente se a função $S \rightarrow \mu_N(S)/\mathbb{P}_N(S)$ é constante, o que implica em $\mu_N = \mathbb{P}_N$. Aplicamos o

princípio variacional para um sistema finito. O mesmo pode ser estendido para sistemas físicos infinitos (veja o Capítulo 15 em [13]).

Nosso principal interesse ao estudar o modelo de polímeros definido através do Hamiltoniano \mathbb{H}_N em (1) é avaliar a distância média quadrática entre as extremidades do polímero.

Caracciolo et al. ([4], 1994) introduziu um modelo de polímeros aleatórios auto-repulsivo com Hamiltoniano em \mathbb{W}_N dado por

$$\bar{\mathbb{H}}_N(S) = g_0 \sum_{0 \leq i < j \leq N} V_{ij} \delta_{S_i, S_j},$$

onde $g_0 > 0$ e as interações $V_{ij} = |i - j|^{-\alpha}$. Para este modelo, foi conjecturado que para dimensão $1 \leq d \leq 4$ existe um expoente estritamente positivo $\gamma = \gamma(d, \alpha)$ tal que a distância média quadrática entre as extremidades do polímero satisfaz o seguinte resultado assintótico

$$\mathbb{E}_{\bar{\mathbb{P}}_N}[\|S_N\|^2] \equiv \sum_{S \in \mathbb{W}_N} \|S_N(S)\|^2 \bar{\mathbb{P}}_N(S) \sim cN^\gamma,$$

onde a medida de Gibbs $\bar{\mathbb{P}}_N$ é definida através do Hamiltoniano $\bar{\mathbb{H}}_N$. Baseado em simulações e argumentos heurísticos, Madras et al. ([26], 1993) apresentaram a conjectura de que para $\beta \in (0, \infty]$ a distância média quadrática do modelo de polímeros com medidas de Gibbs $Q_N^\beta(S)$, cujo Hamiltoniano é

$$\mathbb{H}(S) = \sum_{\substack{0 \leq i, j \leq N \\ i \neq j}} \delta_{S_i, S_j},$$

é tal que

$$\mathbb{E}_{Q_N^\beta}(\|S_N\|^2) \sim DN^{\frac{3}{2}}, \quad \text{quando } N \rightarrow \infty, \quad (2)$$

onde $D = D(\beta) > 0$. Mais recentemente, H. Duminil-Copin e A. Hammond [8] provaram que para $\beta = \infty$, existe $1 \leq \kappa < 2$ tal que

$$\mathbb{E}_{Q_N^\beta}(\|S_N\|^2) \sim DN^\kappa, \quad \text{quando } N \rightarrow \infty.$$

Nada se sabe sobre a conjectura (2) para $\beta \in (0, \infty)$.

Classifica-se um modelo de polímeros aleatórios com medida de Gibbs \mathbb{P}_N definido sobre \mathbb{W}_N de acordo com o comportamento assintótico da distância

média quadrática determinando o expoente $\gamma > 0$ para a qual o seguinte limite existe, é positivo e finito

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N^\gamma} \mathbb{E}_{\mathbb{P}_N}[\|S_N\|^2] = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N^\gamma} \sum_{S \in \mathbb{W}_N} \|S_N\|^2 \mathbb{P}_N(S). \quad (3)$$

Dizemos que o modelo de polímeros é *difusivo* se $\gamma = 1$, *superdifusivo* se $1 < \gamma < 2$ e *balístico* se $\gamma = 2$.

Considerando o Hamiltoniano

$$\tilde{\mathbb{H}}_N(S) = - \sum_{0 \leq i < j \leq N} |i - j|^{-\alpha} \|S_i - S_j\|^2, \quad \text{onde } 3 < \alpha \leq 4,$$

Procacci et. al. ([30], 2008) provaram a existência de constantes positivas $\beta_1 < \beta_2$ tais que o modelo de polímeros apresenta uma transição de fase de um regime difusivo ($\beta < \beta_1$) para um regime balístico ($\beta > \beta_2$). No entanto não se estabeleceu o comportamento do modelo quando $\beta \in [\beta_1, \beta_2]$.

A principal motivação para este trabalho foi construir um modelo de polímeros aleatórios auto-repulsivo para o qual fosse possível obter uma transição de fase difusiva-balística genuína, ou seja, a existência de uma única constante positiva β_c separando o modelo em dois regimes. Este resultado foi obtido para o modelo de polímeros cujo Hamiltoniano é dado em (1) (Teorema B). A principal ferramenta para obtenção do resultado de transição de fase é a comparação do modelo de polímeros com um modelo unidimensional para sistemas ferromagnéticos, denominado modelo de Ising.

Notações diferentes serão usadas para o modelo de polímeros bidimensional e para o modelo de Ising unidimensional. Para o modelo de polímeros bidimensional introduzido neste trabalho, utilizaremos as notações \mathbb{W}_N , $\mathbb{H}_N^{\mathbf{h}}$, $\mathbb{P}_N^{\beta, \mathbf{h}}$ e $\mathbb{E}_{\mathbb{P}_N^{\beta, \mathbf{h}}}$ para o espaço de configurações, Hamiltoniano, medida de Gibbs e esperança com respeito à medida de Gibbs $\mathbb{P}_N^{\beta, \mathbf{h}}$, respectivamente, onde $\beta > 0$ é o inverso da temperatura e $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^2$ é o drift. Para o modelo de Ising unidimensional usaremos as notações Σ_N , $\mathbb{H}_{\Lambda_N}^h$, $P_{\Lambda_N}^{\beta, h}$ e $\langle \cdot \rangle_{\Lambda_N}^{\beta, h}$ para o espaço de configurações, Hamiltoniano, medida de Gibbs e esperança com respeito à medida de Gibbs $P_{\Lambda_N}^{\beta, h}$, respectivamente, onde $\beta > 0$ é o inverso da temperatura e $h \in \mathbb{R}$ é denominado campo externo. A notação para esperança matemática para o modelo de Ising não é habitual em Teoria de Probabili-

dade, mas é usual em referências para o estudo do modelo de Ising, portanto será utilizada também neste trabalho.

Certamente, o modelo de Ising é o sistema físico mais estudado em Mecânica Estatística e possui uma vasta literatura. O Capítulo 1 é dedicado à definição do modelo de Ising unidimensional e à apresentação de propriedades e resultados clássicos que serão importantes na obtenção de resultados para o modelo de polímeros aleatórios bidimensional.

A relação entre o modelo de polímeros e o modelo de Ising unidimensional é apresentada no Capítulo 2. O Lema A permite escrever a medida de Gibbs do modelo de polímeros em termos das medidas de Gibbs de dois modelos de Ising independentes. Considerando-se drift não-nulo, concluímos no Teorema A que para todo $\beta \in (0, \infty)$ o modelo é balístico e não ocorre transição de fase. Quando o drift $\mathbf{h} = 0$ e as interações $V_{ij} = |i - j|^{-\alpha}$ com $1 < \alpha \leq 2$ o resultado de transição de fase mencionado anteriormente (Teorema B) é apresentado.

Além dos resultados para a distância média quadrática, no Capítulo 3 provamos um Teorema do Limite Central para projeções normalizadas do deslocamento total dos polímeros. Este resultado é obtido usando-se o Teorema de Lee-Yang aplicado ao modelo de Ising e a condição de C^2 -regularidade de Wu Liming [25].

Foram utilizadas duas enumerações distintas para os resultados apresentados nesta tese. Resultados obtidos no desenvolvimento desta pesquisa são enumerados por letras maiúsculas e os outros recebem enumeração numérica de acordo com o capítulo e a seção onde se encontram.

Os resultados originais obtidos nesta Tese de Doutorado foram aceitos para publicação no Journal Statistical Physics em 2014, veja referência [6].

Capítulo 1

O Modelo de Ising Unidimensional

1.1 Introdução

Macroscopicamente, um ímã em barra é um dipolo magnético, formado por um pólo norte e um pólo sul. A orientação sul-norte do campo magnético gerado espontaneamente no interior do ímã pode ser representada por um vetor chamado *momento de dipolo magnético*. Podemos imaginar que o ímã é constituído por dipolos magnéticos microscópicos que interagem entre si, e a magnetização do ímã seria a resultante de uma orientação preferencial dos momentos de dipolo magnéticos atômicos.

Modelos ferromagnéticos foram desenvolvidos para representar, de forma simplificada, a interação de spins de elétrons em ímãs reais. Neste capítulo apresentamos o modelo mais estudado de Mecânica Estatística, o modelo de Ising unidimensional ferromagnético.

Em 1920, um esboço do modelo de Ising foi apresentado pela primeira vez por Lenz, em [23], mas o modelo recebeu este nome em 1925 em [17], quando seu aluno E. Ising concluiu em sua Tese de Doutorado, que não existe transição de fase no modelo unidimensional (de primeiros vizinhos), e erroneamente extrapolou seu resultado para o modelo bidimensional. Em 1936, Rudolf Peierls com um argumento bastante engenhoso mostrou em [28] que E. Ising estava errado e que o modelo de Ising tinha transição de fase em

dimensão maior ou igual a dois. Desde então o modelo de Ising d-dimensional vem sendo estudado amplamente, destacando-se resultados relacionados à transição de fase.

Serão apresentados neste capítulo resultados clássicos do modelo de Ising unidimensional, que serão úteis na obtenção de resultados sobre o modelo de polímeros aleatórios bidimensional definido no Capítulo 2.

Na Seção 1.2 é definido o modelo de Ising unidimensional ferromagnético com condição externa livre, que é a principal ferramenta para o desenvolvimento dos resultados do modelo de polímeros bidimensional. Define-se também o modelo de Ising com condição externa. Desigualdades de esperança com respeito à medida de Gibbs do modelo de Ising são apresentadas na Seção 1.3, que serão utilizadas para provar propriedades da magnetização e energia livre, apresentadas na Seção 1.4. A medida de Gibbs a volume infinito é apresentada na Seção 1.5. Por último, o Teorema de Lee-Yang, uma das principais ferramentas usadas para provar um Teorema do Limite Central para o modelo de polímeros, é apresentado na Seção 1.6.

1.2 O Modelo de Ising Unidimensional

Definimos primeiramente o modelo de Ising ferromagnético a volume finito. Considere $\Lambda_N = \{1, 2, \dots, N\}$, onde $N \in \mathbb{N}$. Para cada ponto $j \in \Lambda_N$ (que também será chamado de *sítio*), está associada uma variável aleatória σ_j , chamada *spin* assumindo valores $+1$ (spin para cima) ou -1 (spin para baixo). Considere o seguinte espaço amostral que é chamado de espaço de configurações

$$\begin{aligned} \Sigma_N &= \left\{ \sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N) : \sigma_i \in \{-1, +1\}, \forall i = 1, \dots, N \right\} \\ &= \{-1, +1\}^{\Lambda_N}. \end{aligned}$$

Observação 1.1. *Usualmente, o modelo de Ising a volume finito é definido para conjuntos de sítios simétricos $\{-N, \dots, N\} \subset \mathbb{Z}$. A adaptação ao caso $\Lambda_N = \{1, \dots, N\} \subset \mathbb{N}$ é adequada à necessidade deste trabalho e tem o objetivo de tornar imediatas as aplicações dos resultados do modelo de Ising unidimensional que serão utilizadas nos capítulos seguintes.*

Associada a cada configuração de spin $\sigma \in \Sigma_N$, tem-se uma energia, denominada *Hamiltoniano*, dada por

$$H_{\Lambda_N}^h(\sigma) = - \sum_{1 \leq i < j \leq N} V(j-i)\sigma_i\sigma_j - \sum_{j=1}^N h\sigma_j. \quad (1.1)$$

O parâmetro h , denominado *campo externo*, é um número real que fornece a força de um campo magnético externo atuando em cada sítio $j \in \Lambda_N$. O termo $-V(j-i)\sigma_i\sigma_j$ fornece a energia de interação entre os spins nos sítios i e j . Neste trabalho, a função V , denominada *função interação* será considerada não-negativa. Sob o ponto de vista fenomenológico, a interação não-negativa favorece orientações iguais para os spins, descrevendo um comportamento ferromagnético e é denominada portanto *interação ferromagnética*. Consideramos também que a interação V é *somável*, ou seja, $\sum_{k \in \mathbb{N}} V(k)$ é finito. Para excluir casos triviais, consideramos que $V(j-i) > 0$ para pelo menos um par $i, j \in \Lambda_N$.

O modelo de Ising ferromagnético (ou seja, com interação ferromagnética) é definido através da medida $P_{\Lambda_N}^{\beta, h}$ em $(\Sigma_N, \mathcal{B}(\Sigma_N))$, onde $\mathcal{B}(\Sigma_N)$ representa os borelianos de Σ_N , que atribui a cada $\sigma \in \Sigma_N$ a probabilidade

$$P_{\Lambda_N}^{\beta, h}(\sigma) = \frac{\exp(-\beta H_{\Lambda_N}^h(\sigma))}{Z_{\Lambda_N}^{\beta}(h)}. \quad (1.2)$$

O parâmetro β representa o inverso da temperatura $1/T$ e é positivo. O fator de normalização

$$Z_{\Lambda_N}^{\beta}(h) = \sum_{\sigma \in \Sigma_N} \exp(-\beta H_{\Lambda_N}^h(\sigma)) \quad (1.3)$$

é chamado *função de partição* e a medida $P_{\Lambda_N}^{\beta, h}$ é chamada de *medida de Gibbs a volume finito* em Λ_N .

A medida de Gibbs a volume finito em (1.2) pode ser modificada por uma configuração fixada no exterior de Λ_N . Se considerarmos o experimento físico em que se fixa um spin externo $\omega_j \in \{-1, +1\}$, para cada sítio $j \in \mathbb{N} \setminus \Lambda_N$, tem-se que $\omega = (\omega_{N+1}, \omega_{N+2}, \dots)$ determina uma condição externa. O modelo de Ising ferromagnético com condição externa ω é definido através do Hamiltoniano

$$H_{\Lambda_N}^{h, \omega}(\sigma) = - \sum_{1 \leq i < j \leq N} V(j-i)\sigma_i\sigma_j - \sum_{i=1}^N \left(h + \sum_{j=N+1}^{\infty} V(j-i)\omega_j \right) \sigma_i. \quad (1.4)$$

Cada ω_j , $j \in \Lambda_N^c$, interage com cada spin σ_i , $i \in \Lambda_N$. Comparando os Hamiltonianos em (1.1) e (1.4), a condição externa ω modifica $H_{\Lambda_N}^h$ alterando o campo externo de $h \in \mathbb{R}$ para o valor

$$h_i = h + \sum_{j=N+1}^{\infty} V(j-i)\omega_j, \quad \forall i \in \Lambda_N. \quad (1.5)$$

Como V é absolutamente somável, h_i é bem definido para todo $i \in \Lambda_N$. Sistemas ferromagnéticos em que se tem ausência de condição externa, como em (1.1) são chamados de *modelos ferromagnéticos com condição externa livre*.

A medida de Gibbs a volume finito com condição externa ω , atribui a cada $\sigma \in \Lambda_N$, a probabilidade em $(\Sigma_N, \mathcal{B}(\Sigma_N))$

$$P_{\Lambda_N}^{\beta, h, \omega}(\sigma) = \frac{\exp\left(-\beta H_{\Lambda_N}^{h, \omega}(\sigma)\right)}{Z_{\Lambda_N}^{\beta, \omega}(h)}, \quad (1.6)$$

onde

$$Z_{\Lambda_N}^{\beta, \omega}(h) = \sum_{\sigma \in \Lambda_N} \exp\left(-\beta H_{\Lambda_N}^{h, \omega}(\sigma)\right) \quad (1.7)$$

é a respectiva função de partição. Observe que o Hamiltoniano em (1.4) não apresenta os termos $V(j-i)\omega_i\omega_j$ e $h\omega_i$. De fato, como h e cada ω_i , são fixados, os respectivos termos se cancelam no numerador e denominador em (1.6).

Dois escolhas de condição externa ω são particularmente importantes, aquelas em que $\omega_j = +1$, $\forall j \in \mathbb{N}$ e, respectivamente, -1 . Estas condições externas são chamadas de *mais* e *menos*, respectivamente. As medidas de Gibbs definidas por estas condições externas são denotadas por $P_{\Lambda_N}^{\beta, h, +}$ e $P_{\Lambda_N}^{\beta, h, -}$, respectivamente.

Definição 1.1 (Alcance da Interação).

Dizemos que uma função interação V possui alcance L se

$$L = \inf\{l : V(k) = 0, \forall k > l\}.$$

Vejamos alguns casos particulares do modelo de Ising unidimensional, que também serão importantes:

Exemplo 1.1 (Modelo de Ising de Primeiros Vizinhos).

Considere um número fixo $V_1 > 0$. Para cada $1 \leq i < j \leq N$, defina a função interação

$$V(j-i) = \begin{cases} V_1, & \text{se } j-i=1 \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases}$$

que acopla somente os sítios mais próximos. O modelo de Ising unidimensional em Λ_N com esta interação é chamado de modelo de Ising de primeiros vizinhos e a respectiva medida de Gibbs a volume finito é denotada por $P_{\Lambda_N}^{\beta, h, nn}$.

Exemplo 1.2 (Modelo de Ising de longo alcance).

Considere $i, j \in \Lambda_N$ tal que $i < j$. O modelo de Ising de longo alcance possui interação de alcance infinito dada por

$$V(j-i) = (j-i)^{-\alpha}, \quad \alpha > 1.$$

Exigimos que o expoente α seja maior do que um para que a interação V seja somável, ou seja, $\sum_{k \in \mathbb{N}} V(k) < \infty$.

Definição 1.2 (Estados fundamentais).

As configurações $\sigma \in \Sigma_N$ que maximizam a medida de Gibbs em um modelo (consequentemente minimizam o Hamiltoniano) são chamadas de estados fundamentais do modelo.

Considere σ^+ (respectivamente σ^-) a configuração com $\sigma_j^+ = +1$ (respectivamente $\sigma_j^- = -1$) para todo $j \in \Lambda_N$. Para o modelo de Ising ferromagnético e somável com condição externa livre, é fácil verificar que

- Para $h > 0$, σ^+ é o único estado fundamental;
- Para $h < 0$, σ^- é o único estado fundamental;
- Se $h = 0$, σ^+ e σ^- são estados fundamentais. Serão únicos se a interação V for irredutível em Λ_N , ou seja, se para cada par de sítios $i < j$ em Λ_N , $V(j-i) > 0$ ou existe uma sequência finita $i = i_1, i_2, \dots, i_r = j$ em Λ_N tal que $V(i_{\alpha+1} - i_\alpha) > 0, \forall \alpha = 1, \dots, r-1$.

1.3 Desigualdades de Momento

Nesta seção apresentaremos desigualdades de momento, que serão utilizadas no estudo do modelo de Ising unidimensional. As desigualdades de momento serão aplicadas também no Capítulo 2, auxiliando na obtenção de resultados para o modelo de polímeros bidimensional, visto que este modelo pode ser comparado com o modelo de Ising unidimensional, conforme será apresentado na Seção 2.2.

As desigualdades de momento não se restringem à medida de Gibbs do modelo de Ising unidimensional, $P_{\Lambda_N}^{\beta, h, \omega}$, e serão apresentadas nesta seção de forma mais geral.

Seja $\Lambda \subset \mathbb{N}$ um subconjunto não-vazio e finito, $\{V_{ij}\}_{i,j \in \Lambda}$ números reais não-negativos, e $\{h_i\}_{i \in \Lambda}$ um conjunto de números reais. Para $\Sigma_\Lambda = \{\sigma = (\sigma_i)_{i \in \Lambda} : \sigma_i \in \{-1, +1\}, \forall i \in \Lambda\}$, considere a medida de probabilidade P em $(\Sigma_\Lambda, \mathcal{B}(\Sigma_\Lambda))$ dada por

$$P(\sigma) = \frac{e^{-H(\sigma)}}{Z}, \quad \text{onde} \quad H(\sigma) = - \sum_{i,j \in \Lambda} V_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum_{i \in \Lambda} h_i \sigma_i$$

e $Z = \sum_{\sigma \in \Sigma_\Lambda} \exp(-H(\sigma)).$

A esperança com respeito a P será denotada por $\langle \cdot \rangle$ ou $\langle \cdot \rangle_{h_i}$. A medida P se reduz a $P_{\Lambda_N}^{\beta, h, \omega}$ se $\Lambda = \Lambda_N = \{1, 2, \dots, N\}$, $V_{ij} = \beta V(j-i)$ e $h_i = \beta h + \beta \sum_{j=N+1}^{\infty} V(j-i)\omega_j, \forall i \in \Lambda_N$.

Para B um subconjunto não-vazio de Λ , definimos

$$\sigma_B = \prod_{i \in B} \sigma_i.$$

Para cada $j \in \Lambda$, o valor esperado de cada função projeção $\pi_j(\sigma) = \sigma_j$ será denotado por $\langle \sigma_j \rangle$.

Em modelos ferromagnéticos, o estado de spins paralelos, ou seja, $\sigma_i = \sigma_j$ é mais provável que o estado de spins antiparalelos $\sigma_i = -\sigma_j$, de modo que o valor esperado para o produto $\sigma_i \sigma_j$ é não-negativo. Este fato é estabelecido pela desigualdade GKS-1, apresentada no teorema a seguir. Considerando-se o modelo de Ising, é esperado que a magnetização no sítio $i \in \Lambda_N$, calculada

usando-se o valor médio do spin σ_i , aumente quando aumentamos a intensidade do campo magnético externo aplicado. A desigualdade GKS-2 é usada para verificar esta monotonicidade. As desigualdades GKS-1 e GKS-2 foram provadas por Griffiths em [14], [15] para correlação entre pares, contudo a forma generalizada foi provada por Kelly e Sherman em [20].

Teorema 1.1 (Desigualdade GKS-1).

Considere cada $h_i \geq 0$. Então, para qualquer B subconjunto não-vazio de Λ ,

$$\langle \sigma_B \rangle \geq 0.$$

Demonstração. Por definição,

$$\langle \sigma_B \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma \in \Sigma_\Lambda} \sigma_B \cdot \exp(-H(\sigma))$$

Como a função de partição Z é positiva, basta provar que

$$\sum_{\sigma \in \Sigma_\Lambda} \sigma_B \cdot \exp(-H(\sigma)) = \sum_{\sigma \in \Sigma_\Lambda} \sigma_B \prod_{i,j \in \Lambda} \exp(V_{ij} \sigma_i \sigma_j) \prod_{i \in \Lambda} \exp(h_i \sigma_i) \geq 0.$$

Expandindo-se $\exp(V_{ij} \sigma_i \sigma_j)$ em série de Taylor, temos

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma \in \Sigma_\Lambda} \sigma_B \cdot e^{-H(\sigma)} &= \sum_{\sigma \in \Sigma_\Lambda} \sigma_B \prod_{i \in \Lambda} e^{h_i \sigma_i} \prod_{i,j \in \Lambda} [\cosh(V_{ij}) + \sinh(V_{ij}) \sigma_i \sigma_j] \\ &= \sum_{\sigma \in \Sigma_\Lambda} \sigma_B \prod_{i \in \Lambda} e^{h_i \sigma_i} \prod_{i,j \in \Lambda} \cosh(V_{ij}) [1 + \tanh(V_{ij}) \sigma_i \sigma_j] \quad (1.8) \\ &= \sum_{\sigma \in \Sigma_\Lambda} \sum_m c_m L_m \quad (1.9) \end{aligned}$$

onde (1.9) é obtida desenvolvendo os produtórios em (1.8). Cada termo em $\sum_m c_m L_m$ é constituído de um produto envolvendo as variáveis spins

$$L_m = \sigma_{i_1}^{n_1} \cdots \sigma_{i_m}^{n_m} \prod_{i \in \Lambda} \exp(h_i \sigma_i)$$

e cada termo c_m é constituído pelo produto de funções hiperbólicas, ora $\cosh(V_{ij})$, ora $\cosh(V_{ij}) \tanh(V_{ij})$ e independe das variáveis spins. Como $V_{ij} \geq 0$, cada $c_m \geq 0$. Além disso, se L_m é tal que todos os expoentes

n_k são pares, então $L_m > 0$. Caso haja em L_m pelo menos um expoente ímpar, digamos n_j , então

$$L_m = \sigma_j^{n_j} \prod_{i \in \Lambda} \exp(h_i \sigma_i) = \sigma_j \prod_{i \in \Lambda} \exp(h_i \sigma_i) = \sigma_j \exp(h_j \sigma_j) \prod_{i \in \Lambda \setminus \{j\}} \exp(h_i \sigma_i).$$

Efetuada-se a soma sobre todas as configurações σ , o termo

$$\sum_{\sigma_j \in \{-1, +1\}} \sigma_j \exp(h_j \sigma_j) = 2 \sinh(h_j) > 0,$$

pois $h_j \geq 0$. Portanto a expressão em (1.9) é não-negativa e consequentemente $\sum_{\sigma \in \Sigma_\Lambda} \sigma_B \cdot \exp(-H(\sigma)) \geq 0$. \square

Teorema 1.2 (Desigualdade GKS-2).

Considere cada $h_i \geq 0$. Então, para quaisquer A e B subconjuntos não-vazios de Λ ,

$$\langle \sigma_A \sigma_B \rangle - \langle \sigma_A \rangle \langle \sigma_B \rangle \geq 0.$$

Demonstração. A prova se baseia em um argumento de acoplamento que neste caso se reduz a construção de um sistema de spins duplicados, definido no espaço de configurações $\Sigma_\Lambda \times \Sigma_\Lambda$, que consiste em duas cópias do sistema original, que não interagem entre si, cujo Hamiltoniano é dado por

$$\begin{aligned} H(\sigma, \mu) &= H(\sigma) + H(\mu) \\ &= - \sum_{i,j \in \Lambda} V_{ij} [\sigma_i \sigma_j + \mu_i \mu_j] - \sum_{i \in \Lambda} h_i [\sigma_i + \mu_i]. \end{aligned} \quad (1.10)$$

Valores esperados com respeito à medida de Gibbs associada a este Hamiltoniano serão denotados por $\langle \cdot \rangle^{(2)}$. Observe que

$$\begin{aligned} \langle \sigma_A \rangle^{(2)} &= \langle \mu_A \rangle^{(2)} = \langle \sigma_A \rangle, \\ \langle \sigma_A \mu_B \rangle^{(2)} &= \langle \sigma_A \rangle \langle \mu_B \rangle \quad \text{e} \\ \langle \sigma_A \sigma_B \rangle^{(2)} &= \langle \sigma_A \sigma_B \rangle = \langle \mu_A \mu_B \rangle = \langle \mu_A \mu_B \rangle^{(2)}. \end{aligned}$$

Então

$$\langle \sigma_A \sigma_B \rangle - \langle \sigma_A \rangle \langle \sigma_B \rangle = \langle \sigma_A \sigma_B - \sigma_A \mu_B \rangle^{(2)} = \left\langle \prod_{i \in A} \sigma_i \left(\prod_{i \in B} \sigma_i - \prod_{i \in B} \mu_i \right) \right\rangle^{(2)}.$$

Definindo $X_i = (\sigma_i - \mu_i)/\sqrt{2}$ e $Y_i = (\sigma_i + \mu_i)/\sqrt{2}$, podemos reescrever o lado direito da expressão acima, obtendo

$$\begin{aligned} \langle \sigma_A \sigma_B \rangle - \langle \sigma_A \rangle \langle \sigma_B \rangle = \\ \left\langle \prod_{i \in A} \left(\frac{Y_i + X_i}{\sqrt{2}} \right) \left[\prod_{i \in B} \left(\frac{Y_i + X_i}{\sqrt{2}} \right) - \prod_{i \in B} \left(\frac{Y_i - X_i}{\sqrt{2}} \right) \right] \right\rangle^{(2)}. \end{aligned} \quad (1.11)$$

Expandindo o produto $\prod_{i \in B} (Y_i - X_i)/\sqrt{2}$, qualquer termo com coeficiente negativo será cancelado com o termo correspondente na expansão de $\prod_{i \in B} (Y_i + X_i)/\sqrt{2}$, portanto o lado direito em (1.11) é a esperança de um polinômio em $\{X_i\}$ e $\{Y_i\}$ com coeficientes não-negativos. Para concluir a demonstração, basta provar que para $h_i \geq 0$ e para quaisquer A e B subconjuntos não-vazios de Λ , temos

$$\langle X_A Y_B \rangle^{(2)} \geq 0, \quad \text{onde } X_A = \prod_{i \in A} X_i \quad \text{e} \quad Y_B = \prod_{i \in B} Y_i.$$

De fato,

$$\langle X_A Y_B \rangle^{(2)} = \sum_{(\sigma, \mu) \in \Sigma_\Lambda^2} X_A Y_B \cdot \exp(-H(\sigma, \mu)) \cdot \frac{1}{Z^{(2)}}, \quad (1.12)$$

onde $Z^{(2)}$ é a função de partição com respeito ao Hamiltoniano $H(\sigma, \mu)$ dado em (1.10), que pode ser escrito em termos de $\{X_i\}$ e $\{Y_i\}$ da seguinte maneira

$$H(\sigma, \mu) = - \sum_{i, j \in \Lambda} V_{ij} [X_i X_j + Y_i Y_j] - \sqrt{2} \sum_{i \in \Lambda} h_i Y_i.$$

A não-negatividade da função de partição é imediata. Expandindo a exponencial dada em (1.12) em série de Taylor e fatorando as somas resultantes em somatórios sobre $i \in \Lambda$, a demonstração se reduz a verificar que para cada sítio i e para todos os inteiros não-negativos m e n ,

$$\sum_{(\sigma_i, \mu_i) \in \{-1, +1\}^2} X_i^m Y_i^n = \sum_{(\sigma_i, \mu_i) \in \{-1, +1\}^2} \left(\frac{\sigma_i - \mu_i}{\sqrt{2}} \right)^m \left(\frac{\sigma_i + \mu_i}{\sqrt{2}} \right)^n \geq 0.$$

Como os spins assumem os valores -1 e $+1$, cada termo do somatório é nulo, se m e n são positivos. Se ou m ou n são nulos, os termos do somatório ou são potências de X_i sozinhas ou de Y_i , que resultam em somatórios positivos (se o expoente não-nulo é par) ou nulos (se o expoente não-nulo é ímpar). Este argumento conclui a prova do teorema. \square

A desigualdade a seguir foi provada por Griffiths, Hurst e Shermann em [16]. A demonstração é semelhante à prova da desigualdade GKS-2 e consiste em considerar um sistema de spins quadruplicado no espaço de configurações Σ_Λ^4 , com Hamiltoniano $H(\sigma, \mu, \tilde{\sigma}, \tilde{\mu}) = H(\sigma) + H(\mu) + H(\tilde{\sigma}) + H(\tilde{\mu})$.

Teorema 1.3 (Desigualdade GHS).

Considere cada $h_i \geq 0$. Então para sítios arbitrários $i, j, k \in \Lambda$,

$$\begin{aligned} \left\langle (\sigma_i - \langle \sigma_i \rangle) \cdot (\sigma_j - \langle \sigma_j \rangle) \cdot (\sigma_k - \langle \sigma_k \rangle) \right\rangle &= \langle \sigma_i \sigma_j \sigma_k \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \sigma_k \rangle - \langle \sigma_j \rangle \langle \sigma_i \sigma_k \rangle \\ &\quad - \langle \sigma_k \rangle \langle \sigma_i \sigma_j \rangle + 2 \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \langle \sigma_k \rangle \\ &\leq 0 \end{aligned}$$

Observação 1.2. As três desigualdades apresentadas acima requerem que cada h_i seja não-negativo. Resultados análogos são obtidos para a hipótese de cada h_i não-positivo.

Antes de enunciar a última desigualdade de momento, considere a seguinte relação de ordem parcial em Σ_Λ :

Definição 1.3.

Sejam σ e $\tilde{\sigma}$ configurações em Σ_Λ . Dizemos que $\sigma \leq \tilde{\sigma}$ se $\sigma_j \leq \tilde{\sigma}_j, \forall j \in \Lambda$. Uma função real f em Σ_Λ é dita ser não-decrescente se $f(\sigma) \leq f(\tilde{\sigma})$ sempre que $\sigma \leq \tilde{\sigma}$.

A função projeção $\pi_j(\sigma) = \sigma_j$, para cada $j \in \Lambda$ é um exemplo de função não-decrescente, assim como $f_B(\sigma) = \prod_{i \in B} \frac{1}{2}(1 + \sigma_i)$.

Teorema 1.4 (Desigualdade FKG).

Sejam f e g funções reais não-decrescentes em Σ_Λ . Então, para qualquer $\{h_i\}_{i \in \Lambda}$ em \mathbb{R} , a covariância de f e g é não-negativa, ou seja,

$$\langle fg \rangle - \langle f \rangle \langle g \rangle \geq 0.$$

Em particular, se $h_i \leq \tilde{h}_i$, então $\langle f \rangle_{\{h_i\}} \leq \langle f \rangle_{\{\tilde{h}_i\}}$.

Demonstração. A prova da desigualdade de FKG pode ser encontrada em [11, 24] e também em todos os detalhes na referência [10]. Vamos porém mostrar

como usá-la para provar o segundo resultado da afirmação do teorema acima, isto é, verificar que se $h_i \leq \tilde{h}_i$, então $\langle f \rangle_{\{h_i\}} \leq \langle f \rangle_{\{\tilde{h}_i\}}$.

De fato, pensando agora em h_i não como uma constante mas sim como uma variável real temos que $\partial H / \partial h_i = -\sigma_i$ e também

$$\frac{\partial Z}{\partial h_i} \cdot \frac{1}{Z} = \sum_{\Sigma_\Lambda} \sigma_i \exp(-H(\sigma)) \frac{1}{Z} = \langle \sigma_i \rangle.$$

Desta forma segue que

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial h_i} \langle f \rangle &= \frac{\partial}{\partial h_i} \left\{ \sum_{\Sigma_\Lambda} f(\sigma) \exp[-H(\sigma)] \cdot \frac{1}{Z} \right\} \\ &= \frac{\partial}{\partial h_i} \left\{ \sum_{\Sigma_\Lambda} f(\sigma) \cdot \sigma_i \exp[-H(\sigma)] \cdot \frac{1}{Z} \right\} - \langle f \rangle \cdot \frac{\partial Z}{\partial h_i} \cdot \frac{1}{Z} \\ &= \langle f \cdot \sigma_i \rangle - \langle f \rangle \langle \sigma_i \rangle, \end{aligned}$$

que é não-negativo, já que f e σ_i são não-decrescentes. Portanto $\langle f \rangle_{\{h_i\}}$ é uma função não-decrescente de cada h_i . □

As desigualdades de momento apresentadas acima serão úteis para provar propriedades importantes de esperanças com respeito a medida de Gibbs a volume finito com condição externa $P_{\Lambda_N}^{\beta, h, \omega}$. Usaremos a notação $\langle \cdot \rangle_{\Lambda_N}^{\beta, h, \omega}$ para denotar essas esperanças.

Proposição 1.1.

Considere a medida de Gibbs a volume finito com condição externa ω e campo externo h_i , definido em (1.5), onde $i \in \Lambda_N$.

(a) *Se cada $h_i \geq 0$, então $\langle \sigma_k \rangle_{\Lambda_N}^{\beta, h, \omega} \geq 0$.*

(b) *Se cada $h_i \geq 0$, então $\frac{\partial}{\partial \beta} \langle \sigma_k \rangle_{\Lambda_N}^{\beta, h, \omega} \geq 0$.*

(c) *Se cada $h_i \geq 0$ e cada $\omega_j = 1$, para cada $j \in \Lambda_N^c$, então*

$$\frac{\partial}{\partial V(k)} \langle \sigma_l \rangle_{\Lambda_N}^{\beta, h, \omega} \geq 0 \quad e \quad \frac{\partial}{\partial V(k)} \langle \sigma_l \sigma_m \rangle_{\Lambda_N}^{\beta, h, \omega} \geq 0.$$

(d) Se cada $h_i \geq 0$, então $\frac{\partial^2}{\partial h_i \partial h_j} \langle \sigma_l \rangle_{\Lambda_N}^{\beta, h, \omega} \leq 0$.

(e) Para qualquer h_i , $\frac{\partial}{\partial h_i} \langle \sigma_j \rangle_{\Lambda_N}^{\beta, h, \omega} \geq 0$.

Demonstração. Para simplificar a notação, usaremos

$$\langle \sigma_k \rangle_{\Lambda_N}^{\beta, h, \omega} = \langle \sigma_k \rangle, \quad H_{\Lambda_N}^{h, \omega}(\sigma) = H(\sigma), \quad Z_{\Lambda_N}^{\beta, \omega}(h) = Z \quad \text{e} \quad P_{\Lambda_N}^{\beta, h, \omega}(\sigma) = P(\sigma).$$

(a) É imediato de GKS-1.

(b) Observe que

$$\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = - \sum_{\sigma \in \Sigma_N} H(\sigma) \exp[-\beta H(\sigma)] \cdot \frac{1}{Z} = -\langle H \rangle. \quad (1.13)$$

Então,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \beta} \langle \sigma_k \rangle &= \frac{\partial}{\partial \beta} \left[\sum_{\sigma \in \Sigma_N} \sigma_k \exp[-\beta H(\sigma)] \cdot \frac{1}{Z} \right] \\ &= - \sum_{\sigma \in \Sigma_N} \sigma_k H(\sigma) \exp[-\beta H(\sigma)] \cdot \frac{1}{Z} \\ &\quad - \sum_{\sigma \in \Sigma_N} \sigma_k \exp[-\beta H(\sigma)] \cdot \frac{\partial Z}{\partial \beta} \frac{1}{Z^2}. \end{aligned} \quad (1.14)$$

Substituindo (1.13) em (1.14), obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \beta} \langle \sigma_k \rangle &= - \langle \sigma_k H \rangle + \langle \sigma_k \rangle \langle H \rangle \\ &= \sum_{1 \leq i < j \leq N} V(j-i) [\langle \sigma_k \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_k \rangle \langle \sigma_i \sigma_j \rangle] \\ &\quad + \sum_{i \in \Lambda_N} h_i (\langle \sigma_k \sigma_i \rangle - \langle \sigma_k \rangle \langle \sigma_i \rangle). \end{aligned} \quad (1.15)$$

Aplicando a desigualdade GKS-2 em (1.15), obtemos $\frac{\partial}{\partial \beta} \langle \sigma_k \rangle \geq 0$, pois $h_i \geq 0$.

(c) Tem-se que

$$\frac{\partial H(\sigma)}{\partial V(k)} = - \sum_{\substack{1 \leq i < j \leq N \\ j-i=k}} \sigma_i \sigma_j - \sum_{\substack{i \in \Lambda_N, j \in \Lambda_N^c \\ j-i=k}} \omega_j \sigma_i \quad (1.16)$$

e

$$\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial V(k)} = -\beta \sum_{\substack{1 \leq i < j \leq N \\ j-i=k}} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \beta \sum_{\substack{i \in \Lambda_N, j \in \Lambda_N^c \\ j-i=k}} \omega_j \langle \sigma_i \rangle. \quad (1.17)$$

Substituindo (1.16) e (1.17) na derivada abaixo, temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial V(k)} \langle \sigma_l \rangle &= \beta \sum_{\substack{1 \leq i < j \leq N \\ j-i=k}} [\langle \sigma_l \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_l \rangle \langle \sigma_i \sigma_j \rangle] \\ &\quad + \beta \sum_{\substack{i \in \Lambda_N, j \in \Lambda_N^c \\ j-i=k}} \omega_j [\langle \sigma_l \sigma_i \rangle - \langle \sigma_l \rangle \langle \sigma_i \rangle] \end{aligned}$$

Se cada $h_i \geq 0$, e cada $\omega_j \geq 0$ então $\frac{\partial}{\partial V(k)} \langle \sigma_l \rangle \geq 0$, pela desigualdade GKS-2. A demonstração para $\frac{\partial}{\partial V(k)} \langle \sigma_l \sigma_m \rangle$ é análoga.

(d)

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial h_i \partial h_j} \langle \sigma_l \rangle &= \beta \frac{\partial}{\partial h_i} (\langle \sigma_l \sigma_j \rangle - \langle \sigma_l \rangle \langle \sigma_j \rangle) \\ &= \beta^2 [\langle \sigma_l \sigma_j \sigma_i \rangle - \langle \sigma_l \sigma_j \rangle \langle \sigma_i \rangle - \langle \sigma_j \rangle (\langle \sigma_l \sigma_i \rangle \\ &\quad - \langle \sigma_l \rangle \langle \sigma_i \rangle) - \langle \sigma_l \rangle (\langle \sigma_j \sigma_i \rangle - \langle \sigma_j \rangle \langle \sigma_i \rangle)] \\ &= \beta^2 [\langle \sigma_l \sigma_j \sigma_i \rangle - \langle \sigma_l \rangle \langle \sigma_j \sigma_i \rangle - \langle \sigma_j \rangle \langle \sigma_l \sigma_i \rangle \\ &\quad - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_l \sigma_j \rangle + 2 \langle \sigma_l \rangle \langle \sigma_j \rangle \langle \sigma_i \rangle]. \end{aligned}$$

Se cada $h_i \geq 0$, então $\frac{\partial^2}{\partial h_i \partial h_j} \langle \sigma_l \rangle \leq 0$, pela desigualdade GHS.

(e) $\frac{\partial}{\partial h_i} \langle \sigma_j \rangle = \beta [\langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle] \geq 0$, pela desigualdade FKG.

□

1.4 Magnetização e Energia Livre

Para cada $\sigma \in \Sigma_N$, considere o spin total

$$S_{\Lambda_N}(\sigma) = \sum_{j \in \Lambda_N} \pi_j(\sigma),$$

onde $\pi_j(\sigma) = \sigma_j$. O valor esperado de S_{Λ_N} com respeito à medida $P_{\Lambda_N}^{\beta,h,\omega}$ é uma função importante para o estudo do modelo de Ising unidimensional. Quando for importante explicitar a dependência de ω em relação a Λ_N , escreveremos $\omega(\Lambda_N)$.

Definição 1.4.

A magnetização a volume finito com condição externa ω é o valor médio do spin total em Λ_N com respeito à medida $P_{\Lambda_N}^{\beta,h,\omega}$ e é definida por

$$m_{\Lambda_N}(\beta, h, \omega) = \sum_{\sigma \in \Sigma_N} S_{\Lambda_N}(\sigma) P_{\Lambda_N}^{\beta,h,\omega}(\sigma) = \sum_{j \in \Lambda_N} \langle \sigma_j \rangle_{\Lambda_N}^{\beta,h,\omega},$$

onde $\langle \cdot \rangle_{\Lambda_N}^{\beta,h,\omega}$ denota a esperança com respeito a $P_{\Lambda_N}^{\beta,h,\omega}$. A magnetização a volume finito com condição externa livre, ou seja com respeito à medida $P_{\Lambda_N}^{\beta,h}$ será denotada por $m_{\Lambda_N}(\beta, h)$.

Escreveremos a magnetização a volume finito como $m_{\Lambda_N}(\beta, h, +)$ ou $m_{\Lambda_N}(\beta, h, -)$ quando a condição externa ω for mais ou menos, respectivamente.

Considerando o caso em que a condição externa é livre, a medida de Gibbs a volume finito satisfaz $P_{\Lambda_N}^{\beta,-h}(\sigma) = P_{\Lambda_N}^{\beta,h}(-\sigma)$, para todo $\sigma \in \Sigma_N$. Portanto

$$m_{\Lambda_N}(\beta, -h) = -m_{\Lambda_N}(\beta, h), \quad (1.18)$$

isto implica que no caso do campo externo nulo,

$$m_{\Lambda_N}(\beta, 0) = 0, \quad \forall \beta > 0. \quad (1.19)$$

Além disso, a magnetização a volume finito é limitada pela cardinalidade do conjunto Λ_N , ou seja,

$$|m_{\Lambda_N}(\beta, h)| \leq \sum_{j=1}^N \left| \sum_{\sigma \in \Sigma_N} \sigma_j P_{\Lambda_N}^{\beta,h}(\sigma) \right| \leq N. \quad (1.20)$$

Outras propriedades da magnetização a volume finito com condição externa livre, são enunciadas a seguir.

Proposição 1.2 (Propriedades da Magnetização a volume finito com condição externa livre).

- (a) Para cada $\beta > 0$ fixado, $m_{\Lambda_N}(\beta, h)$ é uma função não-decrescente do parâmetro $h \in \mathbb{R}$ e é uma função não-negativa e côncava para $h \geq 0$.
- (b) Para cada $h \geq 0$ fixado, $m_{\Lambda_N}(\beta, h)$ é uma função não-negativa e não-decrescente como função de $\beta > 0$ e de cada interação $V(k) \geq 0$, $k \in \mathbb{N}$.

Demonstração.

- (a) Vamos mostrar primeiro que $m_{\Lambda_N}(\beta, h) \geq 0$. Para isto tomamos $h_i = h$ em (1.5) para cada sítio $i \in \Lambda_N$. Daí segue do item (a) da Proposição 1.1 que

$$m_{\Lambda_N}(\beta, h) = \sum_{j \in \Lambda_N} \langle \sigma_j \rangle_{\Lambda_N}^{\beta, h} \geq 0.$$

Além disso, pelo item (d) da Proposição 1.1 temos que $m_{\Lambda_N}(\beta, h)$ é côncava para $h \geq 0$, pois

$$\frac{\partial^2 m_{\Lambda_N}}{\partial h^2} = \sum_{j \in \Lambda_N} \frac{\partial^2 \langle \sigma_j \rangle_{\Lambda_N}^{\beta, h}}{\partial h^2} \leq 0$$

Para h real, aplicando o item (e) da Proposição 1.1, tem-se $\frac{\partial m_{\Lambda_N}}{\partial h} \geq 0$, portanto $m_{\Lambda_N}(\beta, h)$ é crescente em h .

- (b) De acordo com os itens (b) e (c) da Proposição 1.1 respectivamente, obtém-se que para $h \geq 0$,

$$\frac{\partial m_{\Lambda_N}}{\partial \beta} \geq 0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial m_{\Lambda_N}}{\partial V(k)} \geq 0.$$

□

Definição 1.5.

A energia livre a volume finito com condição externa ω é definida por

$$f_{\Lambda_N}(\beta, h, \omega) = -\frac{1}{\beta} \log Z_{\Lambda_N}^{\beta, \omega}(h),$$

onde $Z_{\Lambda_N}^{\beta, \omega}(h)$ é a função de partição definida em (1.7). A energia livre a volume finito com condição externa livre é dada por $f_{\Lambda_N}(\beta, h) = -\frac{1}{\beta} \log Z_{\Lambda_N}^{\beta}(h)$, para $Z_{\Lambda_N}^{\beta}(h)$ definido em (1.3).

A magnetização a volume finito com condição externa ω , pode ser obtida derivando com respeito a h a energia livre a volume finito com mesma condição externa

$$\begin{aligned} -\frac{\partial f_{\Lambda_N}(\beta, h, \omega)}{\partial h} &= -\frac{1}{\beta} \frac{\partial Z_{\Lambda_N}^{\beta, \omega}(h)}{\partial h} \frac{1}{Z_{\Lambda_N}^{\beta, \omega}(h)} \\ &= \sum_{j=1}^N \sum_{\sigma \in \Sigma_N} \sigma_j \exp\left(-\beta H_{\Lambda_N}^{h, \omega}(\sigma)\right) \frac{1}{Z_{\Lambda_N}^{\beta, \omega}(h)} \\ &= m_{\Lambda_N}(\beta, h, \omega). \end{aligned}$$

Esta relação permite que a existência do limite quando N tende a infinito da magnetização a volume finito e propriedades importantes sejam apresentadas em termos do limite da energia livre a volume finito. Uma propriedade importante da energia livre a volume finito é que para qualquer sequência de condições externas em Λ_N^c , o limite $\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} f_{\Lambda_N}(\beta, h, \omega(\Lambda_N))$ coincide com o limite $\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} f_{\Lambda_N}(\beta, h)$, ou seja, esta quantidade independe da condição externa.

Lema 1.1.

Para qualquer $\beta > 0$, h real

(a) *Existe o limite*

$$f(\beta, h) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} f_{\Lambda_N}(\beta, h).$$

(b) *Para qualquer sequência de condições externas $\{\omega(\Lambda_N)\}$,*

$$f(\beta, h) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} f_{\Lambda_N}(\beta, h, \omega(\Lambda_N)),$$

ou seja, o limite existe, é independente da escolha da condição externa $\{\omega(\Lambda_N)\}$ e coincide com o limite para a energia livre a volume finito com condição externa livre.

Demonstração.

(a) Note que a função de partição definida em (1.3) satisfaz

$$Z_{\Lambda_N}^{\beta}(h) \leq Z_{\Lambda_M}^{\beta}(h) Z_{\Lambda_{N-M}}^{\beta}(h), \quad \forall 1 \leq M \leq N. \quad (1.21)$$

Assim segue de (1.21) que $\{-\log Z_{\Lambda_N}\}_{N \in \mathbb{N}}$ é uma sequência subaditiva, ou seja,

$$\log Z_{\Lambda_N}^\beta(h) \leq \log Z_{\Lambda_M}^\beta(h) + \log Z_{\Lambda_{N-M}}^\beta(h), \quad \forall 1 \leq M \leq N,$$

e como $f_{\Lambda_N}(\beta, h) = -\frac{1}{\beta} \log Z_{\Lambda_N}^\beta(h)$ segue que

$$f(\beta, h) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} f_{\Lambda_N}(\beta, h) = - \sup_{N \in \mathbb{N}} \frac{1}{N} f_{\Lambda_N}(\beta, h) \text{ existe em } (-\infty, \infty].$$

Como $\inf_{\sigma \in \Sigma_N} H_{\Lambda_N}^{\beta, h} \leq CN$ onde C é uma constante finita, então ∞ pode ser excluído dos valores limitantes.

- (b) A prova deste ítem pode ser obtida como aplicação da seguinte desigualdade: para qualquer medida de probabilidade μ em um espaço Ω e funções $f, g : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ limitadas em Ω , temos

$$\left| \log \int_{\Omega} e^f d\mu - \log \int_{\Omega} e^g d\mu \right| \leq \sup_{x \in \Omega} |f(x) - g(x)|$$

(veja [10], página 54). Em nosso caso, se olhamos para Z_N como uma integral de Lebesgue com respeito a medida de contagem em Σ_{Λ} normalizada obtemos diretamente da desigualdade acima que

$$\frac{1}{N} |f_{\Lambda_N}(\beta, h, \omega) - f_{\Lambda_N}(\beta, h)| \leq \frac{1}{N} \left\| H_{\Lambda_N}^{h, \omega} - H_{\Lambda_N}^h \right\|_{\infty}.$$

Como $f(\beta, h)$ existe, é suficiente provar que o lado direito da desigualdade acima tende a zero quando N tende a infinito. Dado $\varepsilon > 0$, existe N_{ε} tal que $\sum_{k > N_{\varepsilon}} V(k) < \varepsilon$. Para qualquer $\sigma \in \Sigma_N$,

$$\frac{1}{N} \left| H_{\Lambda_N}^{h, \omega}(\sigma) - H_{\Lambda_N}^h(\sigma) \right| \leq \frac{1}{N} \sum_{\substack{i \in \Lambda_N \\ j \in \Lambda_N^c}} V(j-i) \leq \frac{1}{N} \sum_{\substack{i \in \Lambda_N \\ j \in \Lambda_N^c \\ j-i \leq N_{\varepsilon}}} V(j-i) + \varepsilon.$$

Como $\sum_{\substack{i \in \Lambda_N, j \in \Lambda_N^c \\ j-i \leq N_{\varepsilon}}} V(j-i) \leq \max_{k \in \mathbb{N}}(V(k)) \cdot N_{\varepsilon}^2$, a demonstração está completa. □

O Lema 1.1 garante que é suficiente definir o limite da energia livre a volume finito para o caso em que a condição externa é livre.

Definição 1.6.

Sejam $f_{\Lambda_N}(\beta, h)$ e $f_{\Lambda_N}(\beta, h, \omega)$ a energia livre a volume finito com condição externa livre e condição externa ω , respectivamente. A energia livre é definida por

$$\begin{aligned} f(\beta, h) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} f_{\Lambda_N}(\beta, h) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} f_{\Lambda_N}(\beta, h, \omega(\Lambda_N)), \end{aligned} \tag{1.22}$$

para qualquer sequência de condição externa $\{\omega(\Lambda_N)\}$.

O limite da magnetização a volume finito herda a propriedade da energia livre, ou seja também independe da sequência de condição externa e coincide com o limite com condição externa livre. Este é um fato muito importante e sua prova pode ser vista em [10, p. 114].

Definição 1.7.

Considere a magnetização a volume finito com condição externa livre. A magnetização é definida pelo limite

$$m(\beta, h) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} m_{\Lambda_N}(\beta, h).$$

As propriedades da magnetização a volume finito apresentadas em (1.18), (1.19), (1.20) e na Proposição 1.2 se estendem de maneira natural para a magnetização:

- $m(\beta, -h) = -m(\beta, h)$;
- $m(\beta, 0) = 0$, $\forall \beta > 0$;
- $|m(\beta, h)| \leq 1$.
- Para cada $\beta > 0$, $m(\beta, h)$ é uma função não-decrescente de h real e é não-negativa e côncava de $h \geq 0$;
- Para cada $h \geq 0$, $m(\beta, h)$ é uma função não-negativa e não-decrescente de $\beta > 0$ e de cada interação $V(k)$, $k \in \mathbb{N}$.

Proposição 1.3 (Propriedades de magnetização e energia livre).

(a) Para cada $\beta > 0$, $f(\beta, h)$ é uma função côncava e par de h real. Além disso é continuamente diferenciável para $h \neq 0$.

(b) Para $\beta > 0$ e $h \neq 0$, a magnetização $m(\beta, h) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} m_{\Lambda_N}(\beta, h, \omega)$ existe e é independente da escolha da condição externa ω .

(c) Para todo $\beta > 0$ e $h \neq 0$, $m(\beta, h) = -\partial f(\beta, h)/\partial h$.

Demonstração. (a) Concavidade é preservada por limites pontuais. Portanto a concavidade de $f(\beta, h)$ é consequência da concavidade de $f_{\Lambda_N}(\beta, h, \omega)$, para qualquer condição externa ω , que por sua vez é equivalente à desigualdade

$$Z_{\Lambda_N}^\beta(\lambda h_1 + (1 - \lambda)h_2) \leq (Z_{\Lambda_N}^\beta(h_1))^\lambda \cdot (Z_{\Lambda_N}^\beta(h_2))^{1-\lambda},$$

para quaisquer $h_1 \neq h_2$ reais e $0 < \lambda < 1$. Mas a desigualdade acima é uma simples aplicação da desigualdade de Hölder às funções $\exp(\beta \lambda h_1 \sum_{j \in \Lambda_N} \sigma_j)$ e $\exp(\beta(1 - \lambda)h_2 \sum_{j \in \Lambda_N} \sigma_j)$.

(b) Como visto acima a energia livre $f(\beta, \cdot)$ é uma função par pois $H_{\Lambda_N}^{-h}(\sigma) = H_{\Lambda_N}^h(-\sigma)$. Além do mais a energia livre a volume finito está relacionada com a magnetização a volume finito pela derivada com respeito à h , ou equivalentemente

$$\frac{1}{N}(f_{\Lambda_N}(\beta, h) - f_{\Lambda_N}(\beta, 0)) = -\frac{1}{N} \int_0^h m_{\Lambda_N}(\beta, s) ds.$$

Se passarmos ao limite quando $N \rightarrow \infty$, o lado esquerdo se torna $f(\beta, h) - f(\beta, 0)$. Para o lado direito precisamos de uma análise mais refinada. Na igualdade acima, considere $h \geq 0$. Já que $0 \leq m_{\Lambda_N}(\beta, h) \leq N$ usando um argumento tipo diagonal de Cantor, podemos afirmar que existe uma subsequência Λ'_N de Λ_N tal que $m(\beta, h) = \lim_{\Lambda'_N \uparrow \mathbb{N}} m_{\Lambda'_N}(\beta, h)$ existe para qualquer número racional $h \geq 0$ e além do mais é uma função côncava de $h \geq 0$. Usando a propriedade de concavidade desta função, temos imediatamente que $m(\beta, h)$ existe para todo $h \geq 0$ e é côncava, e portanto contínua para $h > 0$. Pelo Teorema da Convergência Dominada,

$$f(\beta, h) - f(\beta, 0) = - \int_0^h m(\beta, s) ds.$$

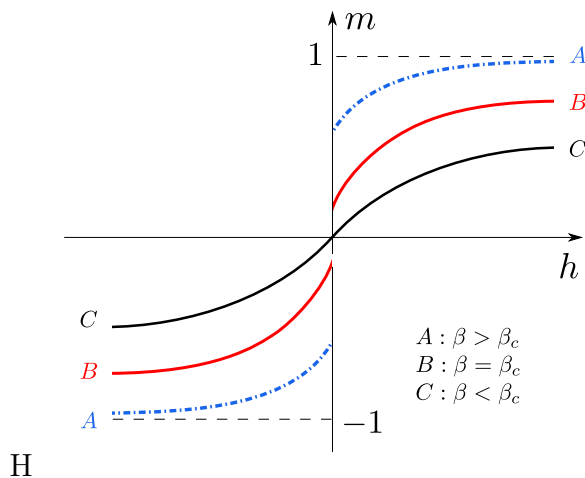


Figura 1.1: Esboço do gráfico da magnetização para alguns valores de $\beta > 0$.

que prova que $f(\beta, h)$ é uma função continuamente diferenciável de $h > 0$ e que $\partial f(\beta, h)/\partial h = -m(\beta, h)$. A mesma demonstração é válida para $h < 0$. Como $f_{\Lambda_N}(\beta, h, \omega)$ é uma função côncava de h real e para $h \neq 0$ $\partial f(\beta, h)/\partial h = -m(\beta, h)$ existe, tem-se que $\lim_{N \rightarrow \infty} m_{\Lambda_N}(\beta, h, \omega_{\Lambda_N})$ existe para toda sequência $\{\Lambda_N\}_{N \rightarrow \infty}$ e

$$m_{\Lambda_N}(\beta, h, \omega(\Lambda_N)) = \frac{-1}{N} \frac{\partial f_{\Lambda_N}(\beta, h, \omega(\Lambda_N))}{\partial h} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} -\frac{\partial}{\partial h} f(\beta, h) = m(\beta, h).$$

Portanto o limite é independente da escolha da condição externa $\{\omega(\Lambda_N)\}$. \square

A energia livre $f(\beta, h)$ não é necessariamente diferenciável em $h = 0$. A não-existência de $\partial f(\beta, 0)/\partial h$ está relacionada ao fato de o sistema permanecer magnetizado depois que o campo externo é removido.

O modelo é dito ter magnetização espontânea quando o efeito de alinhamento construído na medida de Gibbs a volume finito permanece no limite quando $\Lambda_N \uparrow \mathbb{N}$. De forma mais precisa, definimos a magnetização espontânea como se segue.

Definição 1.8.

O modelo de Ising unidimensional é dito ter magnetização espontânea se

$$m(\beta, +) := \lim_{h \rightarrow 0^+} m(\beta, h) > 0.$$

O inverso da temperatura crítica é definido por

$$\beta_c = \sup\{\beta > 0 : m(\beta, +) = 0\}.$$

Teorema 1.5 (Propriedades da Magnetização Espontânea).

(a) Para cada $\beta > 0$, existem os limites

$$m(\beta, +) = \lim_{h \rightarrow 0^+} m(\beta, h), \quad m(\beta, -) = \lim_{h \rightarrow 0^-} m(\beta, h)$$

e $m(\beta, -) = -m(\beta, +)$. Além disso, $m(\beta, +)$ é uma função não-negativa e não-decrescente de $\beta > 0$.

(b) Para cada $\beta > 0$, temos que

$$m(\beta, +) = - \lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{\partial}{\partial h} f(\beta, h) \equiv - \frac{\partial}{\partial h^+} f(\beta, 0)$$

$$m(\beta, -) = - \lim_{h \rightarrow 0^-} \frac{\partial}{\partial h} f(\beta, h) \equiv - \frac{\partial}{\partial h^-} f(\beta, 0)$$

e

$$m(\beta, -) \leq m(\beta, 0) = 0 \leq m(\beta, +). \quad (1.23)$$

Portanto, a magnetização espontânea ocorre em $\beta > 0$ se, e somente se, $f(\beta, h)$ é não diferenciável em $h = 0$, ou seja, $m(\beta, +) > 0$.

Demonstração.

Como $f(\beta, h)$ é côncava para h real e diferenciável para $h \neq 0$, $\partial f / \partial h$ é não-crescente para $h \neq 0$. Além disso,

$$m(\beta, +) = \lim_{h \rightarrow 0^+} m(\beta, h) = - \lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{\partial f(\beta, h)}{\partial h}$$

existe e é igual à derivada a direita de $-f$ em $h = 0$, que denotamos por $\partial f(\beta, 0) / \partial h^+$. O mesmo é válido para $m(\beta, -)$. Para cada $h \geq 0$, $m(\beta, h)$ é uma função não-negativa e não-decrescente de $\beta > 0$, portanto as mesmas propriedades são válidas para $m(\beta, +)$. Como $f(\beta, h)$ é diferenciável em $h = 0$ se, e somente se, $\partial f(\beta, 0) / \partial h^+ = \partial f(\beta, 0) / \partial h^-$, a magnetização ocorre em β se, e somente se, $f(\beta, h)$ é não diferenciável em $h = 0$. \square

De acordo com a parte (b) do Teorema 1.5, a magnetização espontânea corresponde a uma descontinuidade na derivada de primeira ordem $\partial f/\partial h$. Este fato é denominado de *transição de fase de primeira ordem*.

Exemplo 1.3 (Matriz de Transferência).

Verifiquemos que o modelo de Ising de primeiros vizinhos, apresentado no exemplo 1.1, não possui transição de fase de primeira ordem. A demonstração é feita através do uso de uma matriz, chamada de matriz de transferência do modelo.

Por simplicidade, considere o modelo de Ising de primeiros vizinhos com cadeia periódica fechada, ou seja,

$$\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N, \sigma_{N+1} = \sigma_1.$$

É fácil ver que no limite quando $N \rightarrow \infty$, obtém-se o mesmo resultado para cadeia não-periódica.

A função de partição do modelo é

$$\begin{aligned} Z_{\Lambda_N}^{\beta, h, nn} &= \sum_{\sigma \in \Sigma_N} \exp \left(\beta V_1 \sum_{n=1}^N \sigma_n \sigma_{n+1} + \beta h \sum_{n=1}^N \sigma_n \right) \\ &= \sum_{\sigma \in \Sigma_N} \prod_{n=1}^N \exp \left(\beta V_1 \sigma_n \sigma_{n+1} + \frac{\beta h}{2} (\sigma_n + \sigma_{n+1}) \right). \end{aligned} \quad (1.24)$$

Definindo $L(\sigma_n, \sigma_{n+1}) = \exp(\beta V_1 \sigma_n \sigma_{n+1} + \frac{\beta h}{2} (\sigma_n + \sigma_{n+1}))$ e substituindo em (1.24), temos

$$\begin{aligned} Z_{\Lambda_N, nn}^{\beta, h} &= \sum_{\sigma \in \Sigma_N} \prod_{n=1}^N L(\sigma_n, \sigma_{n+1}) \\ &= \sum_{\sigma_N = \pm 1} \sum_{\sigma_{N-1} = \pm 1} \cdots \sum_{\sigma_1 = \pm 1} L(\sigma_1, \sigma_2) \cdot L(\sigma_2, \sigma_3) \cdots L(\sigma_N, \sigma_1) \end{aligned} \quad (1.25)$$

A matriz de transferência (2×2) é definida por

$$L = \begin{pmatrix} L(1, 1) & L(1, -1) \\ L(-1, 1) & L(-1, -1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\beta(V_1+h)} & e^{-\beta V_1} \\ e^{-\beta V_1} & e^{\beta(V_1-h)} \end{pmatrix}. \quad (1.26)$$

Os autovalores da matriz L , dada em (1.26), são as raízes do polinômio característico

$$\det \begin{pmatrix} e^{\beta(V_1+h)} - \lambda & e^{-\beta V_1} \\ e^{-\beta V_1} & e^{\beta(V_1-h)} - \lambda \end{pmatrix} = 0,$$

ou seja,

$$\lambda^2 - \lambda e^{\beta V_1} (e^{\beta h} + e^{-\beta h}) + (e^{2\beta V_1} - e^{-2\beta V_1}) = 0.$$

Portanto, os autovalores de L são

$$\begin{aligned} \lambda_{\pm} &= \frac{1}{2} \left[e^{\beta V_1} (e^{\beta h} + e^{-\beta h}) \pm 2 (e^{2\beta V_1} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta V_1})^{1/2} \right] \\ &= e^{\beta V_1} \cosh(\beta h) \pm (e^{2\beta V_1} \sinh^2(\beta h) + e^{-2\beta V_1})^{1/2} \end{aligned} \quad (1.27)$$

Analisando o primeiro somatório em (1.25), que depende de σ_N , temos que

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma_N = \pm 1} L(\sigma_{N-1}, \sigma_N) L(\sigma_N, \sigma_{N-1}) &= L(\sigma_{N-1}, 1) L(1, \sigma_{N-1}) \\ &\quad + L(\sigma_{N-1}, -1) L(-1, \sigma_{N-1}) \\ &= L^{(2)}(\sigma_{N-1}, \sigma_1), \end{aligned}$$

onde $L^{(2)}(\sigma_{N-1}, \sigma_1)$ é o elemento (σ_{N-1}, σ_1) da matriz L^2 . Utilizando recursivamente o mesmo argumento, obtém-se

$$\begin{aligned} Z_{\Lambda_N, nn}^{\beta, h} &= \sum_{\sigma_1 = \pm 1} L^{(N)}(\sigma_1, \sigma_1) \\ &= \text{traço}(L^{(N)}) \\ &= \lambda_+^N + \lambda_-^N, \end{aligned} \quad (1.28)$$

onde λ_+ e λ_- são respectivamente o maior e menor autovalor de L , dados em (1.27). De acordo com (1.28), podemos escrever a energia livre do modelo de primeiros vizinhos em termos dos autovalores de L ,

$$\begin{aligned} f^{nn}(\beta, h) &= -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{N} \log(\lambda_+^N + \lambda_-^N) \right) \\ &= -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ \frac{1}{N} \log \left[\lambda_+^N \left(1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right) \right] \right\} \\ &= -\frac{1}{\beta} \log(\lambda_+). \end{aligned}$$

Derivando a energia livre com respeito a h , obtemos que a magnetização do modelo de Ising de primeiros vizinhos é

$$m^{nn}(\beta, h) = \frac{\partial f^{nn}}{\partial h}(\beta, h) = \frac{\sinh(\beta h)}{\sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta V_1}}}. \quad (1.29)$$

Como $\sinh(0) = 0$, $m^{nn}(\beta, h)$ se anula quando $h = 0$, para todo $\beta > 0$. Portanto não ocorre transição de fase de primeira ordem no modelo de Ising de primeiros vizinhos, ou seja, $\beta_c = \infty$.

A ausência de transição de fase verificada no Exemplo 1.3 para o modelo de Ising de primeiros vizinhos, também ocorre para qualquer modelo de Ising unidimensional com interação de alcance finito. O Teorema a seguir apresenta condições suficientes sobre a interação para que se tenha transição de fase.

Teorema 1.6.

Seja V uma interação somável e ferromagnética em \mathbb{N} e defina o número $V_0 = \sum_{k \in \mathbb{N}} V(k)$. Então valem os seguintes resultados:

(a) β_c é bem definido e $V_0^{-1} \leq \beta_c \leq \infty$. Em particular, $\beta_c > 0$.

(b) $\beta_c = \infty$ se $\sum_{k \in \mathbb{N}} kV(k) < \infty$

(c) $\beta_c < \infty$ se $V > 0$ e $V(k) \sim k^{-\alpha}$, para $1 < \alpha \leq 2$.

(d) Para $0 < \beta < \beta_c$, $f(\beta, h)$ é diferenciável em $h = 0$ e $m(\beta, +) = 0$.

Para $\beta > \beta_c$, a diferenciabilidade falha e ocorre a magnetização espontânea:

$$m(\beta, -) < 0 < m(\beta, +). \quad (1.30)$$

Referências das Demonstrações.

- (a) Pearce [27] provou este resultado através de comparação com outro modelo ferromagnético unidimensional, denominado modelo de Curie-Weiss.
- (b) É uma consequência dos resultados apresentados por Sakai em [33] e Bricmont et al em [2].
- (c) Segue de [9] que β_c é finito se V é positivo e $V(k) \sim |k|^{-\alpha}$, para algum $1 < \alpha < 2$ e em [12] foi provado o caso em que $V(k) = k^{-2}$.
- (d) Para $0 < \beta < \beta_c$, $m(\beta, +)$ é igual a 0 e portanto $f(\beta, h)$ é diferenciável em $h = 0$. Para $\beta > \beta_c$, $m(\beta, +)$ é positiva e (1.30) segue de (1.23).

□

1.5 Medida de Gibbs a Volume Infinito

Até o momento, o modelo de Ising unidimensional foi apresentado em termos da medida de Gibbs a volume finito, que são medidas de probabilidade em $\Sigma_N = \{-1, +1\}^{\Lambda_N}$, onde $\Lambda_N = \{1, 2, \dots, N\}$. Estudaremos agora a medida de Gibbs a volume infinito, ou seja, no espaço de configuração $\Sigma = \{-1, +1\}^{\mathbb{N}}$. Estas medidas são obtidas através de limites fracos de medidas de Gibbs a volume finito. Primeiramente, estendemos cada medida de Gibbs a volume finito $P_{\Lambda_N}^{\beta, h}$ para uma medida de probabilidade em $(\Sigma, \mathcal{B}(\Sigma))$. Seja

$$B_{\Lambda_N}^\omega = \{\sigma \in \Sigma : \sigma_j = \omega_j, \text{ para cada } j \in \Lambda_N^c\}$$

e π_N a projeção de Σ em Σ_N , ou seja, $(\pi_N(\sigma))_i = \sigma_i$, para $i \in \Lambda_N$. A extensão $\bar{P}_{\Lambda_N}^{\beta, h, \omega}$ da medida de Gibbs a volume finito é definida para cada $A \in \mathcal{B}(\Sigma)$ por

$$\begin{aligned} \bar{P}_{\Lambda_N}^{\beta, h, \omega}(A) &= P_{\Lambda_N}^{\beta, h, \omega}(\pi_N(A \cap B_{\Lambda_N}^\omega)) \\ &= \sum_{\sigma \in \pi_N(A \cap B_{\Lambda_N}^\omega)} P_{\Lambda_N}^{\beta, h, \omega}(\sigma). \end{aligned}$$

Como o suporte de $\bar{P}_{\Lambda_N}^{\beta, h, \omega}$ é o conjunto $B_{\Lambda_N}^\omega$, a extensão é compatível com a condição externa.

Seja $\mathcal{C}(\Sigma)$ o espaço das funções reais limitadas e contínuas em Σ com a norma do supremo. Se f é uma função em $\mathcal{C}(\Sigma)$ tal que o valor de $f(\sigma)$ depende apenas de uma quantidade finita de coordenadas de σ , digamos $\sigma_{i_1}, \sigma_{i_2}, \dots, \sigma_{i_r}$ e Λ_N é um intervalo contendo os sítios i_1, i_2, \dots, i_r , então a restrição de f para as coordenadas $\{\sigma_i, i \in \Lambda_N\}$ define uma função em $\mathcal{C}(\Sigma_N)$. Denotaremos a restrição de f pelo mesmo símbolo f . Se $\sigma = \pi_N(\bar{\sigma})$, com $\sigma \in \Sigma_N$ e $\bar{\sigma} \in \Sigma$, então $f(\sigma) = f(\bar{\sigma})$ e

$$\int_{\Sigma} f(\sigma) d\bar{P}_{\Lambda_N}^{\beta, h, \omega} = \int_{\Sigma_N} f(\sigma) dP_{\Lambda_N}^{\beta, h, \omega}.$$

De agora em diante, denotaremos a extensão $\bar{P}_{\Lambda_N}^{\beta, h, \omega}$ pelo mesmo símbolo $P_{\Lambda_N}^{\beta, h, \omega}$ usado para a medida original.

Sejam $\mathcal{M}(\Sigma)$ o conjunto das medidas de probabilidade em $(\Sigma, \mathcal{B}(\Sigma))$.

Definição 1.9. Seja $\{P_N, N = 1, 2, \dots\}$ uma sequência de medidas de probabilidade em $\mathcal{M}(\Sigma)$. Dizemos que uma medida de probabilidade $P \in \mathcal{M}(\Sigma)$ é o limite fraco de $\{P_N, N = 1, 2, \dots\}$, denotado por $P = w\text{-}\lim_{N \rightarrow \infty} P_N$, se para toda $f \in \mathcal{C}(\Sigma)$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \int_{\Sigma} f(\sigma) dP_N = \int_{\Sigma} f(\sigma) dP.$$

Se um limite fraco P existe, então é único. Se definirmos em Σ a métrica

$$\|\sigma - \tilde{\sigma}\| = \sum_{j \in \mathbb{N}} |\sigma_j - \tilde{\sigma}_j| 2^{-j},$$

$(\Sigma, \|\cdot\|)$ é um espaço métrico compacto e $\mathcal{M}(\Sigma)$ também é compacto com respeito a convergência fraca, portanto qualquer sequência de medidas de Gibbs a volume finito $\{P_{\Lambda}^{\beta, h, \omega}, \Lambda \uparrow \mathbb{N}\}$ com condição externa arbitrária $\{\omega(\Lambda)\}$ possui subsequência convergente $\{P_{\Lambda'}^{\beta, h, \omega(\Lambda')}\}$. É natural investigar a dependência dos limites em relação à escolha de condições externas. Para diferentes valores de β e h , situações distintas ocorrem:

- existe um único limite fraco, independente da escolha da condição externa e o limite é invariante por translação;
- O limite fraco depende da escolha da condição externa e pode ou não ser invariante por translação, termo que será definido adiante.

Considere o conjunto de limites

$$\mathcal{G}_{\beta, h}^0 = \left\{ P \in \mathcal{M}(\Sigma) : P = w\text{-}\lim_{\Lambda' \uparrow \mathbb{N}} P_{\Lambda'}^{\beta, h, \omega(\Lambda')} \right\},$$

onde $\{\Lambda'\}$ é uma sequência crescente de subconjuntos de \mathbb{N} cuja união é \mathbb{N} e $\omega(\Lambda')$ é uma condição externa para Λ' . Definimos $\mathcal{G}_{\beta, h}$ como sendo o fecho da envoltória convexa de $\mathcal{G}_{\beta, h}^0$, ou seja, é o fecho com respeito à convergência fraca do conjunto de combinações convexas

$$\left\{ P \in \mathcal{M}(\Sigma) : P = \sum_{j=1}^k \lambda_j P_j, \lambda_j > 0, \sum_{j=1}^k \lambda_j = 1 \text{ e } P_j \in \mathcal{G}_{\beta, h}^0 \right\}.$$

Cada medida em $\mathcal{G}_{\beta, h}$ é chamada uma *medida de Gibbs a volume infinito*. Quando $\mathcal{G}_{\beta, h}$ possui mais de uma medida, dizemos que ocorre uma transição de fase de primeira ordem.

Definição 1.10. *Seja $T : \Sigma \rightarrow \Sigma$ o shift, definido por $T(\sigma)_j = \sigma_{j+1}$, para $j \in \mathbb{N}$. Uma medida de probabilidade P em $(\Sigma, \mathcal{B}(\Sigma))$ é dita ser invariante por translação, se o shift T preserva P , ou seja, $P(B) = P(T^{-1}(B))$, para todo $B \in \mathcal{B}(\Sigma)$.*

Denotamos por $\mathcal{M}_S(\Sigma)$ o conjunto das medidas de probabilidade invariantes por translação em $\mathcal{B}(\Sigma)$.

Cada medida de Gibbs a volume infinito que é invariante por translação é chamada de uma fase.

Definição 1.11. *Seja $\{P_N, N = 1, 2, \dots\}$ uma sequência de medidas de probabilidade em $(\Sigma, \mathcal{B}(\Sigma))$. Um subconjunto \mathcal{L} de $\mathcal{C}(\Sigma)$ é chamado de classe determinante de convergência se a existência do limite $\lim_{N \rightarrow \infty} \int_{\Sigma} f dP_N$ para cada $f \in \mathcal{L}$ implica que $\{P_N, N = 1, 2, \dots\}$ converge fracamente para alguma medida de probabilidade P .*

Como Σ é compacto, o próprio $\mathcal{C}(\Sigma)$ é uma classe determinante de convergência. Outro exemplo conhecido é o subconjunto formado por todas as funções $p(\sigma) = \prod_{i \in B} \sigma_i$, se $B \in \mathbb{N}$ é finito e não vazio e $p(\sigma) = 1$, se B é vazio. Será importante para a prova da existência da medida de Gibbs a volume infinito uma variação desta classe determinante de convergência.

Lema 1.2.

Para B um subconjunto finito e não vazio de \mathbb{N} , defina

$$f_B(\sigma) = \prod_{i \in B} \frac{1}{2}(1 + \sigma_i) \quad e \quad f_B(\sigma) = 1, \quad se \quad B = \emptyset.$$

O subconjunto de $\mathcal{C}(\Sigma)$ formado por todas as funções f_B é uma classe determinante de convergência.

Escreveremos $\langle \cdot \rangle_{\Lambda_N}^{\beta, h, \omega}$ para a esperança com respeito à medida de Gibbs $P_{\Lambda_N}^{\beta, h, \omega}$. O Lema 1.3 relaciona $m(\beta, h)$, $m(\beta, +)$ e $m(\beta, -)$ com as quantidades $\langle \sigma_i \rangle^{\beta, h, +}$ e $\langle \sigma_i \rangle^{\beta, h, -}$, definidas por

$$\langle \sigma_i \rangle^{\beta, h, +} = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \sigma_i \rangle_{\Lambda_N}^{\beta, h, +} \quad e \quad \langle \sigma_i \rangle^{\beta, h, -} = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \sigma_i \rangle_{\Lambda_N}^{\beta, h, -},$$

e mostra também que os números reais $\langle \sigma_i \rangle^{\beta, h, \pm}$ são na verdade médias com respeito às medidas $P^{\beta, h, \pm}$.

Lema 1.3.

Seja V uma interação ferromagnética e somável em \mathbb{N} .

(a) Para $\beta > 0$ e $h \neq 0$

$$\langle \sigma_i \rangle^{\beta, h, +} = m(\beta, h) = -\frac{\partial f}{\partial h}(\beta, h) = \langle \sigma_i \rangle^{\beta, h, -}.$$

(b) Para $\beta > 0$ e $h = 0$,

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i \rangle^{\beta, 0, +} = m(\beta, +) &= -\frac{\partial f}{\partial h^+}(\beta, 0) \geq 0, \\ \langle \sigma_i \rangle^{\beta, 0, -} = m(\beta, -) &= -\frac{\partial f}{\partial h^-}(\beta, 0) \leq 0 \end{aligned}$$

e pelo item (a) do Teorema 1.5, $\langle \sigma_i \rangle^{\beta, 0, +} = -\langle \sigma_i \rangle^{\beta, 0, -}$. A magnetização espontânea ocorre em β se, e somente se $\langle \sigma_i \rangle^{\beta, 0, +} = m(\beta, +) > 0$.

Para provar que os limites fracos $P^{\beta, h, +} = w\text{-}\lim_{N \rightarrow \infty} P_{\Lambda_N}^{\beta, h, +}$ e $P^{\beta, h, -} = w\text{-}\lim_{N \rightarrow \infty} P_{\Lambda_N}^{\beta, h, -}$ existem, basta provar que para qualquer conjunto finito e não vazio $B \subset \mathbb{N}$, os limites $\lim_{N \rightarrow \infty} \langle f_B \rangle_{\Lambda_N}^{\beta, h, +}$ e $\lim_{N \rightarrow \infty} \langle f_B \rangle_{\Lambda_N}^{\beta, h, -}$ existem. O Teorema 1.7 garante a existência de $P^{\beta, h, +}$ e $P^{\beta, h, -}$ e relaciona a ocorrência de transição de fase de primeira ordem com a existência de magnetização espontânea.

Teorema 1.7.

Seja V uma interação ferromagnética somável em \mathbb{N} .

(a) Para cada $\beta > 0$, e h real, os limites fracos

$$P^{\beta, h, +} = w\text{-}\lim_{N \rightarrow \infty} P_{\Lambda_N}^{\beta, h, +} \quad e \quad P^{\beta, h, -} = w\text{-}\lim_{N \rightarrow \infty} P_{\Lambda_N}^{\beta, h, -}$$

existem e são invariantes por translação. Portanto $\mathcal{G}_{\beta, h}$ e $\mathcal{G}_{\beta, h} \cap \mathcal{M}_S$ são não vazios.

(b) $P^{\beta, h, +}$ é igual a $P^{\beta, h, -}$ se, e somente se $\frac{\partial f}{\partial h}(\beta, h)$ existe. Para estes valores de β e h , definimos $P^{\beta, h} \equiv P^{\beta, h, +} = P^{\beta, h, -}$.

(c) Se $\frac{\partial f}{\partial h}(\beta, h)$ existe, então $P^{\beta, h}$ é a única medida em $\mathcal{G}_{\beta, h}$ e portanto em $\mathcal{G}_{\beta, h} \cap \mathcal{M}_S$, ou seja, não ocorre transição de fase de primeira ordem.

(d) Para $\beta > \beta_c$, $P^{\beta,0,+} \neq P^{\beta,0,-}$. De fato,

$$\int_{\Sigma} \sigma_i dP^{\beta,0,+} = m(\beta, +) > 0,$$

$$\int_{\Sigma} \sigma_i dP^{\beta,0,-} = m(\beta, -) < 0.$$

Então para $\beta > \beta_c$ e $h = 0$ uma transição de fase de primeira ordem ocorre.

(e) Para $\beta > \beta_c$, a interseção $\mathcal{G}_{\beta,0} \cap \mathcal{M}_S(\Sigma)$ contém todas as combinações

$$\lambda P^{\beta,0,+} + (1 - \lambda) P^{\beta,0,-}, \quad 0 \leq \lambda \leq 1.$$

Demonstração.

(a) Basta provar que os limites $\langle f_B \rangle^{\beta,h,+} = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle f_B \rangle_{\Lambda_N}^{\beta,h,+}$ e $\langle f_B \rangle^{\beta,h,-} = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle f_B \rangle_{\Lambda_N}^{\beta,h,-}$ existem.

Para B um subconjunto não vazio e finito de \mathbb{N} , escolha um inteiro $N(B)$, tal que $B \subset \Lambda_N$, $\forall N > N(B)$. Então f_B é não-decrescente em Σ_N , sempre que $N \leq N(B)$. A desigualdade FKG garante que $\langle f_B \rangle_{\Lambda_N}^{\beta,h,+}$ é uma sequência não-decrescente e $\langle f_B \rangle_{\Lambda_N}^{\beta,h,-}$ é uma sequência não-crescente, quando $N \rightarrow \infty$, que garante a existência dos limites. De fato, para h_i , definido em (1.5) o campo externo h pode ser escolhido como sendo dependente do sítio i , e será denotado por \tilde{h}_i . Se \tilde{h}_i tende a ∞ , então h_i tende a ∞ . Escolha $N' > N \geq N(B)$, então $\Lambda_N \subset \Lambda_{N'}$. Fazendo h_i tender a ∞ , para cada $i \in \Lambda_{N'} \setminus \Lambda_N$, a desigualdade FKG implica que $\langle f_B \rangle_{\Lambda_N}^{\beta,h,+} \leq \langle f_B \rangle_{\Lambda_{N'}}^{\beta,h,+}$. Analogamente, prova-se que $\langle f_B \rangle_{\Lambda_N}^{\beta,h,-} \geq \langle f_B \rangle_{\Lambda_{N'}}^{\beta,h,-}$. Além disso, $\langle f_{B+k} \rangle^{\beta,h,+} = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle f_{B+k} \rangle_{\Lambda_N}^{\beta,h,+}$ também existe, para qualquer $k \in \mathbb{N}$. Como a interação $V(j-i)$ é invariante por translação, então $\langle f_{B+k} \rangle_{\Lambda_{N+k}}^{\beta,h,+} = \langle f_B \rangle_{\Lambda_N}^{\beta,h,+}$. Passando ao limite quando $N \rightarrow \infty$,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \langle f_{B+k} \rangle_{\Lambda_N}^{\beta,h,+} = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle f_{B+k} \rangle_{\Lambda_{N+k}}^{\beta,h,+} = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle f_B \rangle_{\Lambda_N}^{\beta,h,+} = \langle f_B \rangle^{\beta,h,+}.$$

Portanto os limites fracos $P^{\beta,h,+}$ e $P^{\beta,h,-}$ existem e são invariantes por translação.

- (b) Se $\frac{\partial f}{\partial h}(\beta, h)$ existe, então $\beta > 0$ e $h \neq 0$ ou $0 < \beta < \beta_c$ e $h = 0$. Em ambos os casos, o Lema 1.3 garante que

$$\begin{aligned}\langle \sigma_i \rangle^{\beta, h, +} &= \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \sigma_i \rangle_{\Lambda_N}^{\beta, h, +} = m(\beta, h) = -\frac{\partial f}{\partial h}(\beta, h) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \sigma_i \rangle_{\Lambda_N}^{\beta, h, -} = \langle \sigma_i \rangle^{\beta, h, -}.\end{aligned}$$

Uma propriedade da classe determinante de convergência é que para qualquer $B \subset \mathbb{N}$ finito e não vazio,

$$0 \leq \langle f_B \rangle^{\beta, h, +} - \langle f_B \rangle^{\beta, h, -} \leq |B| \cdot (\langle \sigma_i \rangle^{\beta, h, +} - \langle \sigma_i \rangle^{\beta, h, -}),$$

ou seja, $\langle f_B \rangle^{\beta, h, +} = \langle f_B \rangle^{\beta, h, -}$ para qualquer B (veja [10], página 120). Portanto $P^{\beta, h, +} = P^{\beta, h, -}$.

Suponha que $P^{\beta, h, +} = P^{\beta, h, -}$ para quaisquer h real e $\beta > 0$. Se $h \neq 0$, então $\frac{\partial f}{\partial h}(\beta, h)$ existe pelo item (a) do Lema 1.1. Se $h = 0$, então

$$\begin{aligned}\langle \sigma_i \rangle^{\beta, 0, +} &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{\Sigma} \sigma_i dP_{\Lambda_N}^{\beta, 0, +} = \int_{\Sigma} \sigma_i dP^{\beta, 0, +} \\ &= \int_{\Sigma} \sigma_i dP^{\beta, 0, -} = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{\Sigma} \sigma_i dP_{\Lambda_N}^{\beta, 0, -} = \langle \sigma_i \rangle^{\beta, 0, -}.\end{aligned}$$

Pelo item (b) do Lema 1.3, segue que $\frac{\partial f}{\partial h}(\beta, 0)$ existe.

- (c) Para qualquer intervalo Λ_N contendo B , e qualquer condição externa ω ,

$$\langle f_B \rangle_{\Lambda_N}^{\beta, h, -} \leq \langle f_B \rangle_{\Lambda_N}^{\beta, h, \omega} \leq \langle f_B \rangle_{\Lambda_N}^{\beta, h, +}.$$

Potanto, se $P^{\beta, h, +} = P^{\beta, h, -} = P^{\beta, h}$, então os conjuntos $\mathcal{G}_{\beta, h}$ e $\mathcal{G}_{\beta, h} \cap \mathcal{M}_S$ possuem uma única medida $P^{\beta, h}$.

- (d) Para $\beta > \beta_c$, $\frac{\partial f}{\partial h}(\beta, 0)$ não existe. Então $\langle \sigma_i \rangle^{\beta, 0, +} \neq \langle \sigma_i \rangle^{\beta, 0, -}$, que implica em $P^{\beta, 0, +} \neq P^{\beta, 0, -}$. Portanto do item (b) do Lema 1.3,

$$\langle \sigma_i \rangle^{\beta, 0, +} = \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{\Sigma} \sigma_i dP_{\Lambda_N}^{\beta, 0, +} = \int_{\Sigma} \sigma_i dP^{\beta, 0, +} = m(\beta, +) > 0.$$

O mesmo argumento é válido para $\langle \sigma_i \rangle^{\beta, 0, -}$.

- (e) Como $\mathcal{G}_{\beta, 0} \cap \mathcal{M}_S(\Sigma)$ é convexo, então contém todas as medidas $\lambda P^{\beta, 0, +} + (1 - \lambda) P^{\beta, 0, -}$, $0 \leq \lambda \leq 1$.

□

O resultado a seguir será importante no desenvolvimento de um dos resultados do Capítulo 2. Sua demonstração se encontra em [21].

Lema 1.4. *Sejam $\beta > \beta_c$, $h = 0$ e interação V positiva, invariante por translação e somável. A medida de Gibbs a volume infinito $P^{\beta,0}$ é tal que*

$$P^{\beta,0} = \frac{1}{2} [P^{\beta,0,+} + P^{\beta,0,-}].$$

Em particular,

$$\langle \sigma_B \rangle^{\beta,0} = \frac{1}{2} [\langle \sigma_B \rangle^{\beta,0,+} + \langle \sigma_B \rangle^{\beta,0,-}], \quad (1.31)$$

para qualquer $B \subset \mathbb{N}$, não-vazio e finito.

1.6 Teorema de Lee-Yang

Em 1952, Lee e Yang propuseram uma teoria para análise do fenômeno de transição de fase baseada na localização dos zeros da função de partição $Z_{\Lambda_N}^\beta(h)$ como uma função de h complexo. No trabalho [22], eles provaram que certos polinômios p de grau N (chamados polinômio de Lee-Yang) em uma variável complexa z tem todas suas raízes no círculo unitário $|z| = 1$.

Ao identificar a função de partição do modelo de Ising unidimensional como um polinômio de Lee-Yang, prova-se que todas os zeros de $Z_{\Lambda_N}^\beta(h)$, se encontram no eixo imaginário de h . Consequentemente, a energia livre $f(\beta, h)$, definida em 1.22, é uma função analítica de h , quando a parte real de h é não-nula.

Esta seção foi baseada nos trabalhos [5], [7] e [31], com as devidas adaptações para o modelo de Ising unidimensional abordado neste trabalho e tem o objetivo de provar a analiticidade da energia livre $f(\beta, h)$ e a convergência uniforme do seu limite. Estes resultados serão apresentados no Teorema 1.9, que será utilizado posteriormente na demonstração do Teorema C, que estabelece um Teorema do Limite Central para o modelo de polímeros bidimensional definido no Capítulo 2.

Definição 1.12 (Polinômio de Lee-Yang).

Seja (S, S') uma partição de $\Lambda_N = \{1, 2, \dots, N\}$ e $|S|$ a cardinalidade do conjunto S . A função $p_N : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ é um polinômio de Lee-Yang se

$$p_N(z) = \sum_{S \in \mathcal{P}(\Lambda_N)} z^{|S|} \prod_{i \in S} \prod_{j \in S'} A_{ij}, \quad (1.32)$$

onde $\{A_{ij}\}_{i,j \in \Lambda_N}$ são números complexos tais que para todo i e j ,

$$\begin{cases} |A_{ij}| \leq 1, \\ A_{ij} = \overline{A_{ji}}, \end{cases}$$

Se $S = \emptyset$ ou $S' = \emptyset$ convencionamos que $\prod_{i \in S} \prod_{j \in S'} A_{ij} = 1$.

Exemplo 1.4.

Os polinômios de Lee-Yang de grau 1, 2 e 3 são, respectivamente

$$\begin{aligned} p_1(z) &= 1 + z \\ p_2(z) &= 1 + z(A_{12} + \overline{A_{12}}) + z^2 \\ p_3(z) &= 1 + z(A_{12}A_{13} + \overline{A_{12}}A_{23} + \overline{A_{13}}A_{23}) \\ &\quad + z^2(A_{13}A_{23} + A_{12}\overline{A_{23}} + \overline{A_{12}}A_{13}) \\ &\quad + z^3. \end{aligned}$$

No caso geral, polinômios de Lee-Yang de grau N são funções multivariadas. Apresentamos na Definição 1.12 a particularização da definição de polinômio de Lee-Yang, por ser suficiente para a aplicação neste trabalho. O mesmo ocorre para o Teorema de Lee-Yang enunciado abaixo, onde se considerou somente o caso univariado de polinômio de Lee-Yang. A demonstração do Teorema de Lee-Yang pode ser encontrada em [5].

Teorema 1.8 (Teorema de Lee-Yang).

Se um polinômio de Lee-Yang é tal que $p_N(z) = 0$, então $|z| = 1$.

Corolário 1.1.

Considere $Z_{\Lambda_N}^\beta(h)$ a função de partição do modelo de Ising unidimensional com condição externa livre, definida em (1.3). Se $Z_{\Lambda_N}^\beta(h) = 0$, então $h = 0$.

Para provar o Corolário 1.1, basta escrever a função de partição $Z_{\Lambda_N}^\beta(h)$ como um polinômio de Lee-Yang e aplicar o Teorema 1.8.

Sem perda de generalidade, a prova do Corolário 1.1 pode ser feita para a função de partição

$$\tilde{Z}_{\Lambda_N}^\beta(h) = \sum_{\sigma \in \Lambda_N} \exp \left(\beta \sum_{1 \leq i < j \leq N} V(j-i)(\sigma_i \sigma_j - 1) + h \sum_{j=1}^N (\sigma_j - 1) \right).$$

De fato, temos que $Z_{\Lambda_N}^\beta(h) = \exp \left[\beta \left(\sum_{1 \leq i < j \leq N} V(j-i) + Nh \right) \right] \tilde{Z}_{\Lambda_N}^\beta(h)$, ou seja, $Z_{\Lambda_N}^\beta(h) = 0$ se, e somente se, $\tilde{Z}_{\Lambda_N}^\beta(h) = 0$. O motivo de trabalharmos com $\tilde{Z}_{\Lambda_N}^\beta(h)$ ao invés de $Z_{\Lambda_N}^\beta(h)$ é a maior facilidade em escrevê-lo como polinômio de Lee-Yang.

Demonstração do Corolário 1.1.

Reescreva

$$\tilde{Z}_{\Lambda_N}^\beta(h) = \sum_{\sigma \in \Lambda_N} F_1(\sigma) F_2(\sigma)$$

onde

$$F_1(\sigma) = \exp \left(\sum_{1 \leq i < j \leq N} \beta V(j-i)(\sigma_i \sigma_j - 1) \right)$$

e

$$F_2(\sigma) = \exp \left(\beta h \sum_{j=1}^N (\sigma_j - 1) \right).$$

Para cada $\sigma = (\sigma_i)_{i \in \Lambda_N} \in \Sigma_N$, defina $S_\sigma = \{i : \sigma_i = -1\} \subset \mathcal{P}(\Lambda_N)$, o que determina uma bijeção entre Σ_N e $\mathcal{P}(\Lambda_N)$. Observe que

$$\sigma_i - 1 = \begin{cases} -2, & \text{se } i \in S_\sigma, \\ 0, & \text{c.c.} \end{cases}$$

Portanto, $F_2(\sigma) = \exp(-2\beta h |S_\sigma|)$. Observe ainda que

$$\sigma_i \sigma_j - 1 = \begin{cases} 0, & \text{se } i, j \in S_\sigma \text{ ou } i, j \in \Lambda_N - S_\sigma, \\ -2, & \text{c.c.} \end{cases}$$

Defina

$$A_{ij} = A_{ji} = \begin{cases} 1, & \text{se } i, j \in S_\sigma \text{ ou } i, j \in \Lambda_N - S_\sigma, \\ \exp(-2\beta V(j-i)), & \text{c.c.,} \end{cases}$$

o que permite concluir que $F_1(\sigma) = \prod_{i \in S_\sigma} \prod_{j \in \Lambda_N - S_\sigma} A_{ij}$. Portanto $\tilde{Z}_{\Lambda_N}^\beta(h)$ é um polinômio de Lee-Yang.

Pelo Colário 1.1, se $\tilde{Z}_{\Lambda_N}^\beta(h) = 0$ então $|z| = \exp(-2\beta h) = 1$. Como $\beta > 0$, então $h = 0$. \square

Os dois resultados enunciados a seguir serão utilizados na prova da analiticidade da energia livre e da convergência uniforme de seu limite. Ambos são resultados clássicos de Análise Complexa. As demonstrações podem ser encontradas em [35].

Lema 1.5 (Teorema de Vitali). *Seja $\{g_N\}_{N=1}^\infty$ uma sequência de funções analíticas em uma região $\mathcal{D} \subset \mathbb{C}$ tal que*

$$|g_N(z)| \leq M, \text{ para todo } z \in \mathcal{D} \text{ e } N \in \mathbb{N}$$

e suponha que $g_N(z)$ tenda a um limite em um conjunto com ponto de acumulação no interior de \mathcal{D} . Então, $g_N(z)$ converge uniformemente com limite em qualquer região limitada por um contorno no interior de \mathcal{D} . O limite é portanto uma função analítica de z .

Lema 1.6 (Teorema de Hurwitz). *Seja $g_N(z)$ uma sequência de funções analíticas numa região $\mathcal{D} \subset \mathbb{C}$, limitada por uma curva fechada simples e $g_N(z) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} g(z)$ uniformemente em \mathcal{D} , onde g não é identicamente nula. Considere z_0 um ponto no interior de \mathcal{D} . Então, z_0 é um zero de g se, e somente se, é um zero de infinitas funções da sequência $\{g_N\}$.*

Teorema 1.9. *Considere o modelo de Ising unidimensional com interação V somável. A energia livre*

$$f(\beta, h) = -\frac{1}{\beta} \left(\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log Z_{\Lambda_N}^\beta(h) \right)$$

existe e é analítica $\forall h \in \mathbb{C}$ tal que $\text{Re}(h) \neq 0$. Além disso a convergência do limite acima é localmente uniforme em h .

Demonstração. A existência da energia livre foi provada no Lema 1.1. Começamos a demonstração provando que

$$\frac{1}{N} \log Z_{\Lambda_N}^\beta(h) \leq \log 2 + \beta(V + |h|), \quad (1.33)$$

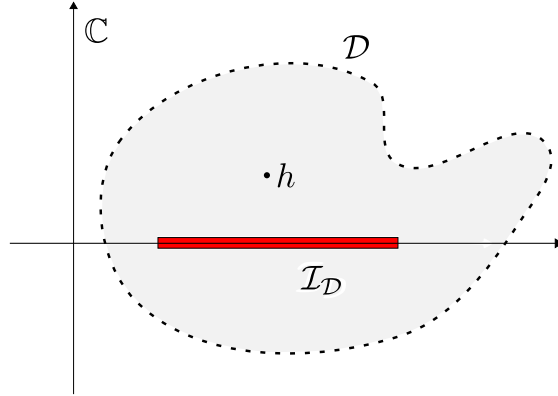


Figura 1.2: Região \mathcal{D}

onde $V = \sum_{k=1}^{\infty} V(k)$. De fato,

$$\begin{aligned}
\frac{1}{N} \log Z_{\Lambda_N}^{\beta}(h) &\leq \frac{1}{N} \log \left\{ \sum_{\sigma \in \Sigma_N} \exp \left[\beta \left(\sum_{1 \leq i < j \leq N} V(j-i) \sigma_i \sigma_j + \sum_{i=1}^N |h| \sigma_i \right) \right] \right\} \\
&\leq \frac{1}{N} \log \left\{ \sum_{\sigma \in \Sigma_N} \exp \left[\beta \left(\sum_{1 \leq i < j \leq N} V(j-i) + N|h| \right) \right] \right\} \\
&\leq \frac{1}{N} \log \{ 2^N \exp \beta N(V + |h|) \} \\
&= \log 2 + \beta(V + |h|).
\end{aligned}$$

Pelo Corolário 1.1, segue que $Z_{\Lambda_N}^{\beta}(h)$ não possui zeros se $\text{Re}(h) > 0$, portanto para qualquer região \mathcal{D} simplesmente conexa contida em $\{z \in \mathbb{C} : \text{Re}(z) > 0\}$ podemos encontrar um ramo do logaritmo complexo em \mathcal{D} tal que a seguinte função é analítica em \mathcal{D} :

$$g_{\Lambda_N}(\beta, h) = \left[Z_{\Lambda_N}^{\beta}(h) \right]^{1/N} = \exp \left[\frac{1}{N} \log Z_{\Lambda_N}^{\beta}(h) \right].$$

De acordo com a desigualdade (1.33),

$$g_{\Lambda_N}(\beta, h) \leq 2 \exp(\beta(V + |h|)). \quad (1.34)$$

Considere agora que \mathcal{D} é uma região limitada e simplesmente conexa no plano complexo h , tal que \mathcal{D} contém em seu interior um segmento do eixo

real positivo, denotado por $\mathcal{I}_{\mathcal{D}}$ (veja Figura 1.2). Então

$$g(\beta, h) = \lim_{N \rightarrow \infty} g_{\Lambda_N}(\beta, h) = \lim_{N \rightarrow \infty} \exp(-\beta f_{\Lambda_N}(\beta, h))$$

existe no segmento $\mathcal{I}_{\mathcal{D}}$, pois o Lema 1.1 garante a existência da energia livre $f(\beta, h)$, para todo $\beta > 0$ e h real não-nulo. Além disso, da desigualdade (1.34), existe uma constante $E(\mathcal{D}, \beta)$ tal que

$$g_{\Lambda_N}(\beta, h) \leq E(\mathcal{D}, \beta) \text{ para todo } h \in \mathcal{D} \text{ e } N \in \mathbb{N}.$$

Pelo Corolário 1.1, para cada N na sequência $\{Z_{\Lambda_N}^\beta\}_{N=1}^\infty$, nenhum zero de $Z_{\Lambda_N}^\beta$, e conseqüentemente de g_{Λ_N} , ocorre em \mathcal{D} . A função g pode ser estendida a uma função analítica para $h \in \mathcal{D}$ e portanto analítica no segmento do eixo real $\mathcal{I}_{\mathcal{D}}$. Temos portanto que em qualquer região limitada $\mathcal{D}' \subset \mathcal{D}$, a sequência $\{g_{\Lambda_N}(\beta, h)\}_{N=1}^\infty$ definida por continuação analítica através do eixo real positivo em \mathcal{D} , converge uniformemente para $g(\beta, h)$.

De fato, a sequência de funções analíticas $\{g_{\Lambda_N}(\beta, h)\}_{N=1}^\infty$ é limitada em \mathcal{D} e converge em uma porção do eixo em que h é real, contido em \mathcal{D} . Pelo Lema 1.5, a sequência $\{g_{\Lambda_N}(\beta, h)\}_{N=1}^\infty$ converge para uma função analítica no interior de \mathcal{D} e converge uniformemente em \mathcal{D}' , que podemos considerar como simplesmente conexo. Pelo Lema 1.6, o limite g não tem zeros no interior de \mathcal{D} . Conseqüentemente,

$$\log(g(\beta, h)) = -\beta f(\beta, h)$$

é analítica no interior de \mathcal{D} e limitada em \mathcal{D}' , logo a energia livre também o é. Além disso, a convergência localmente uniforme de $g_{\Lambda_N}(\beta, h)$ para $g(\beta, h)$ garante a convergência localmente uniforme da energia livre $f(\beta, h)$. □

Capítulo 2

Distância Média Quadrática no Modelo de Polímeros

2.1 Introdução

Estudaremos neste trabalho um modelo de polímeros representado na rede bidimensional \mathbb{Z}^2 como passeios aleatórios em que os monômeros são os vértices do passeio e as ligações químicas são representadas pelas arestas.

No Capítulo 1 foram apresentados conceitos importantes e clássicos sobre o modelo de Ising unidimensional. O modelo de polímeros bidimensional será estudado em termos de dois modelos de Ising unidimensionais independentes e identicamente distribuídos. Esta relação permitiu a obtenção de resultados importantes para o modelo de polímeros bidimensional que serão apresentados neste capítulo e no Capítulo 3.

Mais especificamente, este capítulo visa compreender a configuração espacial do polímero. Estudaremos uma versão simplificada deste problema, através da análise da distância entre as extremidades do polímero em função de seu comprimento (ou seja, do número de monômeros que constituem o polímero), denominada distância média quadrática.

A Seção 2.2 é dedicada à definição do modelo de polímeros bidimensional, e a relação entre este modelo e o modelo de Ising unidimensional será apresentada na Seção 2.3. Analisando a distância média quadrática do modelo de polímeros, verificaram-se duas situações distintas. No caso em que o mo-

delo apresenta um drift não-nulo, ou seja, uma direção fixada favorecendo a orientação para o crescimento do polímero, o modelo apresenta um comportamento alongado (esticado), independente da temperatura do meio em que o polímero está imerso, conforme apresentado na Seção 2.4. Quando o drift é nulo, o modelo apresenta dois regimes distintos, dependendo da temperatura do meio. Provamos na Seção 2.5 que uma mudança abrupta ocorre em um ponto crítico β_c . De fato, se o inverso da temperatura $\beta > \beta_c$, o modelo é mais "espalhado" e viaja no espaço com taxa N^2 e se $\beta < \beta_c$ o modelo de polímeros é mais "enrolado", já que a taxa é N .

2.2 O Modelo de Polímeros Aleatórios Bidimensional

O modelo de polímeros bidimensional definido neste capítulo é o principal objeto de estudo deste trabalho. Cada polímero será modelado como um subconjunto conexo de \mathbb{Z}^2 , onde os monômeros (cada molécula que constitui o polímero) são os vértices e as ligações químicas conectando os monômeros são as arestas do caminho. Mais precisamente, para cada $N \in \mathbb{N}$ considere o espaço amostral dado por

$$\mathbb{W}_N := \{S = (S_0, S_1, \dots, S_N) : S_i \in \mathbb{Z}^2, S_0 = 0 \text{ e } \|S_{i+1} - S_i\|_1 = 1\},$$

onde $\|\cdot\|_1$ denota a norma em ℓ^1 .

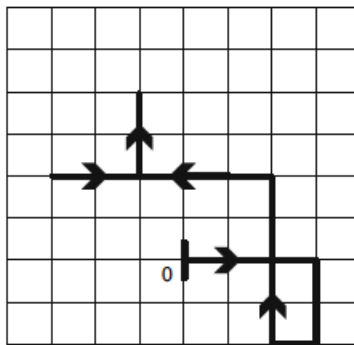


Figura 2.1: Polímero Aleatório em \mathbb{W}_{18}

Para cada polímero $S \in \mathbb{W}_N$, considere $X_i = S_i - S_{i-1}$ o i -ésimo passo do polímero aleatório, ou seja, $X_i \in \{\pm e_1, \pm e_2\}$, onde $e_1 = (1, 0)$ e $e_2 = (0, 1)$. A energia de cada polímero é dada pelo Hamiltoniano

$$\mathbb{H}_N^{\mathbf{h}}(S) = - \sum_{1 \leq i < j \leq N} V(j-i) \cdot \langle X_i, X_j \rangle - \langle \mathbf{h}, S_N \rangle \quad (2.1)$$

onde $V(j-i) \in \mathbb{R}$, são *interações* não-negativas (denominadas ferromagnéticas) e somáveis ($\sum_{k \in \mathbb{N}} V(k) < \infty$), $\langle \cdot, \cdot \rangle$ é o produto interno usual, $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^2$ é um vetor fixado chamado de *drift*.

A probabilidade de um polímero $S \in \mathbb{W}_N$ com respeito ao inverso da temperatura, $\beta > 0$, é dada pela seguinte expressão

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_N^{\beta, \mathbf{h}}(S) &= \frac{1}{\mathbb{Z}_N^{\beta}(\mathbf{h})} \exp\left(-\beta \mathbb{H}_N^{\beta, \mathbf{h}}(S)\right) \\ &= \frac{1}{\mathbb{Z}_N^{\beta}(\mathbf{h})} \exp\left[\beta \left(\sum_{1 \leq i < j \leq N} V(j-i) \cdot \langle X_i, X_j \rangle + \langle \mathbf{h}, S_N \rangle\right)\right], \end{aligned} \quad (2.2)$$

onde $\mathbb{Z}_N^{\beta}(\mathbf{h})$ é o fator de normalização, chamado de *função de partição*, dada por

$$\mathbb{Z}_N^{\beta}(\mathbf{h}) = \sum_{S \in \mathbb{W}_N} \exp\left[\beta \left(\sum_{1 \leq i < j \leq N} V(j-i) \cdot \langle X_i, X_j \rangle + \langle \mathbf{h}, S_N \rangle\right)\right]. \quad (2.3)$$

Os estados fundamentais para o modelo de polímeros bidimensional, ou seja, os polímeros mais prováveis, são os que minimizam o Hamiltoniano (2.1). Observe que o termo $-\langle X_i, X_j \rangle$ é mínimo quando $X_i = X_j$, favorecendo uma configuração geométrica de alinhamento dos polímeros. O termo $-\langle \mathbf{h}, S_N \rangle = -\sum_{i=1}^N \langle \mathbf{h}, X_i \rangle$ é mínimo quando cada X_i tem a mesma direção e sentido que o drift \mathbf{h} . Os estados fundamentais serão portanto os polímeros alinhados na direção do drift. O modelo de polímeros bidimensional é dito auto-repulsivo pois o Hamiltoniano (2.1) não favorece auto-interseções nos polímeros.

Uma quantidade que permite avaliar geometricamente o quanto a auto-repulsividade causa um espalhamento no polímero é a distância média quadrática, definida por

$$\mathbb{E}_N^{\beta, \mathbf{h}}[\|S_N\|^2] = \sum_{S \in \mathbb{W}_N} \|S_N(S)\|^2 \mathbb{P}_N^{\beta, \mathbf{h}}(S). \quad (2.4)$$

Nosso principal interesse neste capítulo consiste em estudar o comportamento assintótico da distância média quadrática para N grande, como função do inverso da temperatura β , do drift \mathbf{h} e das interações $V(j - i)$.

Usaremos as seguintes nomenclaturas para o modelo de polímeros:

Definição 2.1. Fixados $\beta > 0$ e $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^2$, se existe $\gamma > 0$ tal que o limite

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N^\gamma} \mathbb{E}_N^{\beta, \mathbf{h}} [\|S_N\|^2]$$

existe, é positivo e finito, dizemos que este modelo de polímeros é difusivo, se $\gamma = 1$, superdifusivo, se $1 < \gamma < 2$ e balístico, se $\gamma = 2$.

Exemplo 2.1. Considere o passeio aleatório simples e simétrico (SRW) em \mathbb{Z}^2 , ou seja, o caminho conexo $\{S_N\}_{n=0}^\infty$ definido por

$$S_0 = 0, \quad S_N = \sum_{k=1}^N X_k, \quad \text{para } N \in \mathbb{N},$$

onde $\{X_k\}_{k \in \mathbb{N}}$ é uma sequência de variáveis aleatórias i.i.d's assumindo valores em \mathbb{Z}^2 , com distribuição marginal

$$P(X_1 = x) = \begin{cases} \frac{1}{4}, & \text{se } x \in \mathbb{Z}^2 \text{ e } \|x\| = 1 \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

O passeio aleatório simples e simétrico é difusivo. De fato,

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(\|S_N\|^2) &= \mathbb{E} \left\langle \sum_{i=1}^N X_i, \sum_{j=1}^N X_j \right\rangle = \sum_{i,j=1}^N \mathbb{E} \langle X_i, X_j \rangle \\ &= N + \sum_{i \neq j=1}^N \mathbb{E} \langle X_i, X_j \rangle = N. \end{aligned}$$

A mesma demonstração é válida para SRW em \mathbb{Z}^d , para $d \in \mathbb{N}$, onde $P(X_1 = x) = 1/2^d$ se $x \in \mathbb{Z}^d$ e $\|x\| = 1$.

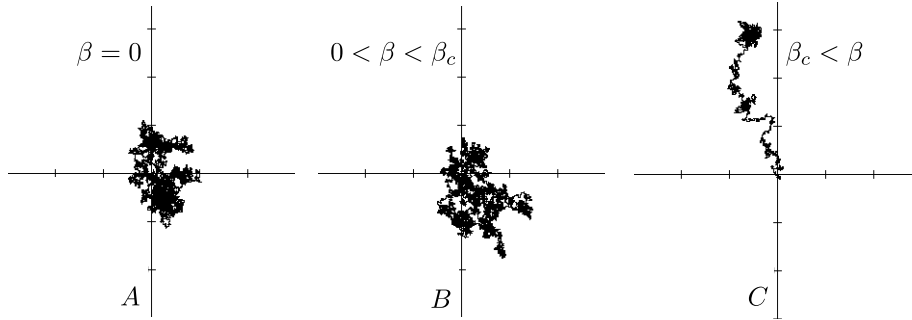


Figura 2.2: Representação do modelo de polímeros na ausência de drift, de acordo com o Teorema B. Para $\beta = 0$ o modelo coincide com o SRW e é difusivo; quando $0 < \beta < \beta_c$ o modelo é difusivo e quando $\beta > \beta_c$ o modelo é balístico.

Por fornecer uma informação relevante sobre o comportamento de modelos de polímeros aleatórios, a distância média quadrática foi utilizada para a análise da distribuição espacial de outros modelos em outras referências. Em alguns casos apenas conjecturas foram apresentadas. Madras e Slade ([26], 1993) consideraram o modelo de polímeros em \mathbb{W}_N com Hamiltoniano e medida de Gibbs

$$\mathbb{H}_N(S) = \sum_{\substack{0 \leq i, j \leq N \\ i \neq j}} \delta_{S_i, S_j}, \quad Q_N^\beta(S) = \frac{1}{\mathbb{Z}_N^\beta} \exp(-\beta \mathbb{H}_N(S)). \quad (2.5)$$

O Hamiltoniano em (2.5) conta o número total de auto-interseções do polímero de tamanho N , ocorrendo uma penalidade para cada uma delas e o modelo é portanto auto-repulsivo. Observe que para $\beta = 0$, o modelo é o SRW e portanto é difusivo (conforme o exemplo 2.1). Para o outro extremo, ou seja, quando $\beta = \infty$, o modelo é o passeio aleatório auto-evitante, onde Q_N^∞ consiste na distribuição uniforme para polímeros de comprimento N sem auto-interseção. Baseado em simulações e argumentos heurísticos Madras e Slade conjecturaram em [26] que o modelo é superdifusivo, para qualquer $\beta \in (0, \infty]$. Mais especificamente, a distância média quadrática do modelo de polímeros dado em (2.5) é tal que

$$\mathbb{E}_{Q_N^\beta}(\|S_N\|^2) \sim DN^{\frac{3}{2}}, \quad \text{quando } N \rightarrow \infty,$$

onde $D = D(\beta) > 0$. Um avanço no estudo deste modelo foi obtido recentemente por Hugo Duminil e Hammond ([8], 2013), provando que o modelo apresenta comportamento sub-balístico quando $\beta = \infty$ (caso auto-evitante).

Caracciolo, Parisi e Pelissetto ([4], 1994) introduziram um modelo de polímeros aleatórios auto-repulsivo, com Hamiltoniano em \mathbb{W}_N dado por

$$\bar{\mathbb{H}}_N(S) = g_0 \sum_{0 \leq i < j \leq N} V(j-i) \delta_{S_i, S_j},$$

onde $g_0 > 0$ e as iterações $V(j-i) = |i-j|^{-\alpha}$ e conjecturaram a existência de um expoente estritamente positivo $\gamma = \gamma(d, \alpha)$ tal que a distância média quadrática satisfaz o resultado assintótico

$$\mathbb{E}_{\bar{\mathbb{P}}_N}[\|S_N\|^2] = \sum_{S \in \mathbb{W}_N} \|S_N\|^2 \bar{\mathbb{P}}_N(S) \sim cN^\gamma,$$

onde a medida de Gibbs $\bar{\mathbb{P}}_N$ é dada pelo Hamiltoniano $\bar{\mathbb{H}}_N$.

Para o modelo de polímeros bidimensional, definido pelo Hamiltoniano (2.1), obtivemos dois resultados de acordo com a classificação da distância média quadrática, a saber, Teorema A e Teorema B, que serão apresentados nas seções 2.4 e 2.5, respectivamente. Antes de apresentá-los, discutiremos na próxima seção a relação entre o modelo de polímeros bidimensional e o modelo de Ising unidimensional.

2.3 Relação entre o Modelo de Ising e o Modelo de Polímeros

Uma ferramenta essencial para a demonstração dos resultados deste trabalho é a comparação entre o modelo de polímeros bidimensional e duas cópias independentes do modelo de Ising unidimensional com condição de fronteira livre. Esta técnica foi introduzida por M. Suzuki [34] em 1967, para o modelo de Potts. A mesma técnica foi utilizada por Procacci, Sanchis e Scoppola, em [30], para o estudo da distância média quadrática do modelo de polímeros bidimensional com Hamiltoniano

$$\tilde{\mathbb{H}}_N(S) = - \sum_{0 \leq i < j \leq N} |i-j|^{-\alpha} \|S_i - S_j\|^2 \quad \text{onde } 3 < \alpha \leq 4.$$

Foi provado em [30] a existência de constantes positivas $\beta_1 \neq \beta_2$ que comprovam uma transição de fase de um regime difusivo ($\beta < \beta_1$) para um regime balístico ($\beta > \beta_2$).

O objetivo principal desta Tese de Doutorado foi introduzir um modelo de polímeros bidimensional para o qual fosse possível obter uma transição de fase difusiva-balística genuína, ou seja, a existência de um único β_c separando o modelo em dois regimes distintos. O resultado de transição de fase será apresentado no Teorema B. O ponto crítico β_c , para a transição difusiva-balística coincide com o ponto crítico para a transição de fase de primeira ordem do modelo de Ising unidimensional, apresentado no item (c) do Teorema 1.6.

Apresentaremos nesta seção três lemas com comparações entre os modelos. O Lema A para as medidas de Gibbs, que é a essência da comparação entre os modelos, como consequência, foram obtidos o Lema B, para a distância média quadrática, e o Lema C, para a função de partição.

Lema A. *Para $e_1 = (1, 0)$, $e_2 = (0, 1)$ e $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^2$, defina $h_1 = \langle \mathbf{h}, e_1 - e_2 \rangle$ e $h_2 = \langle \mathbf{h}, e_1 + e_2 \rangle$. Dado um polímero $S \in \mathbb{W}_N$, existem únicos σ e $\tilde{\sigma}$ em Σ_N , tais que*

$$\mathbb{P}_N^{\beta, \mathbf{h}}(S) = P_{\Lambda_N}^{\frac{\beta}{2}, h_1}(\sigma) \cdot P_{\Lambda_N}^{\frac{\beta}{2}, h_2}(\tilde{\sigma}). \quad (2.6)$$

Demonstração.

Considere $T : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ a rotação por um ângulo de $\pi/4$ no sentido anti-horário. Dado $S = (S_0, S_1, \dots, S_N) \in \mathbb{W}_N$, cada passo $X_i = S_i - S_{i-1} \in \{\pm e_1, \pm e_2\}$, logo cada vetor TX_i pode ser escrito como

$$TX_i = \sigma_i \frac{e_1}{\sqrt{2}} + \tilde{\sigma}_i \frac{e_2}{\sqrt{2}}, \quad (2.7)$$

onde σ_i e $\tilde{\sigma}_i$ são v.a.'s i.i.d.'s assumindo valores $\{-1, 1\}$, $\forall i = 1, \dots, N$.

Definindo-se $\sigma := (\sigma_1, \dots, \sigma_N)$ e $\tilde{\sigma} := (\tilde{\sigma}_1, \dots, \tilde{\sigma}_N)$, é fácil ver que existe uma correspondência biunívoca entre o par ordenado $(\sigma, \tilde{\sigma})$ e o polímero $S \in \mathbb{W}_N$.

Denotando $T(S) = (TS_0, TS_1, \dots, TS_N)$, provaremos o resultado com um passo intermediário, ou seja,

$$\mathbb{P}_N^{\beta, \mathbf{h}}(S) = \mathbb{P}_N^{\beta, T\mathbf{h}}(TS) = P_{\Lambda_N}^{\frac{\beta}{2}, h_1}(\sigma) P_{\Lambda_N}^{\frac{\beta}{2}, h_2}(\tilde{\sigma}),^1 \quad (2.8)$$

¹Consideramos a medida de Gibbs $\mathbb{P}_N^{\beta, T\mathbf{h}}$ definida para polímeros em $T(\mathbb{W}_N)$.

A primeira igualdade em (2.8) é obtida diretamente pela substituição de $\langle X_i, X_j \rangle$ por $\langle TX_i, TX_j \rangle$ e $\langle \mathbf{h}, S_N \rangle$ por $\langle T\mathbf{h}, TS_N \rangle$, já que o produto interno é invariante por rotação.

Para provar a segunda igualdade em (2.8), observe que

$$\begin{aligned} \langle T\mathbf{h}, TS_N \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{i=1}^N \left[\sigma_i \langle T\mathbf{h}, e_1 \rangle + \tilde{\sigma}_i \langle T\mathbf{h}, e_2 \rangle \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{i=1}^N \left[\sigma_i \langle \mathbf{h}, T^* e_1 \rangle + \tilde{\sigma}_i \langle \mathbf{h}, T^* e_2 \rangle \right] \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left[\sigma_i \langle \mathbf{h}, e_1 - e_2 \rangle + \tilde{\sigma}_i \langle \mathbf{h}, e_1 + e_2 \rangle \right] \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left[\sigma_i h_1 + \tilde{\sigma}_i h_2 \right], \end{aligned}$$

onde T^* é o operador adjunto de T . Sabendo ainda que $\langle TX_i, TX_j \rangle = \frac{1}{2}(\sigma_i \sigma_j + \tilde{\sigma}_i \tilde{\sigma}_j)$, temos,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_N^{\beta, T\mathbf{h}}(TS) &= \frac{\exp \left[\beta \left(\sum_{1 \leq i < j \leq N} V(j-i) \cdot \langle TX_i, TX_j \rangle + \langle T\mathbf{h}, TS_N \rangle \right) \right]}{\sum_{S \in \mathbb{W}_N} \exp \left[\beta \left(\sum_{1 \leq i < j \leq N} V(j-i) \cdot \langle TX_i, TX_j \rangle + \langle T\mathbf{h}, TS_N \rangle \right) \right]} \\ &= \frac{\exp \frac{\beta}{2} \left(\sum_{1 \leq i < j \leq N} V(j-i) (\sigma_i \sigma_j + \tilde{\sigma}_i \tilde{\sigma}_j) + \sum_{i=1}^N (\sigma_i h_1 + \tilde{\sigma}_i h_2) \right)}{\sum_{\sigma, \tilde{\sigma} \in \Sigma_N} \exp \frac{\beta}{2} \left(\sum_{1 \leq i < j \leq N} V(j-i) (\sigma_i \sigma_j + \tilde{\sigma}_i \tilde{\sigma}_j) + \sum_{i=1}^N (\sigma_i h_1 + \tilde{\sigma}_i h_2) \right)} \\ &= P_{\Lambda_N}^{\frac{\beta}{2}, h_1}(\sigma) P_{\Lambda_N}^{\frac{\beta}{2}, h_2}(\tilde{\sigma}), \end{aligned}$$

que conclui a verificação de (2.8) e a demonstração do lema. \square

A técnica utilizada no Lema A não se aplica para o modelo de polímeros tridimensional. De fato, analisando a transfirmção linear dada em (2.7), a base canônica de \mathbb{R}^3 possui 6 elementos enquanto que 3 cópias independentes do modelo de Ising unidimensional fornecem 8 combinações distintas.

Lema B. *Sejam $h_1 = \langle \mathbf{h}, e_1 - e_2 \rangle$ e $h_2 = \langle \mathbf{h}, e_1 + e_2 \rangle$. Então,*

$$\mathbb{E}_N^{\beta, \mathbf{h}} [\|S_N\|^2] = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \left[\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda_N}^{\frac{\beta}{2}, h_1} + \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda_N}^{\frac{\beta}{2}, h_2} \right], \quad (2.9)$$

onde $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda_N}^{\beta, h}$ é o valor esperado de $\sigma_i \sigma_j$ com respeito à medida de Gibbs do modelo de Ising unidimensional com condição externa livre, $P_{\Lambda_N}^{\beta, h}$.

Demonstração.

Observe que

$$\langle S_N, S_N \rangle = \langle TS_N, TS_N \rangle = \sum_{i,j=1}^N \langle TX_i, TX_j \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N (\sigma_i \sigma_j + \tilde{\sigma}_i \tilde{\sigma}_j).$$

Então, utilizando a igualdade acima e o Lema A, temos

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_N^{\beta, \mathbf{h}} (\|S_N\|^2) &= \sum_{S \in \mathbb{W}_N} \|S_N\|^2 \mathbb{P}_N^{\beta, \mathbf{h}}(S) \\ &= \sum_{\sigma \in \Sigma_N} \sum_{\tilde{\sigma} \in \Sigma_N} \sum_{i,j=1}^N \frac{1}{2} (\sigma_i \sigma_j + \tilde{\sigma}_i \tilde{\sigma}_j) P_{\Lambda_N}^{\frac{\beta}{2}, h_1}(\sigma) P_{\Lambda_N}^{\frac{\beta}{2}, h_2}(\tilde{\sigma}) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \left[\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda_N}^{\frac{\beta}{2}, h_1} + \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda_N}^{\frac{\beta}{2}, h_2} \right], \end{aligned}$$

concluindo assim a demonstração. □

Lema C.

Considere $\mathbb{Z}_N^\beta(\mathbf{h})$ a função de partição do modelo de polímeros aleatórios, definido em (2.3) e $Z_{\Lambda_N}^\beta(h)$ a função de partição do modelo de Ising unidimensional com condição externa livre, definido em (1.3). Então

$$\mathbb{Z}_N^\beta(\mathbf{h}) = Z_{\Lambda_N}^{\beta/2}(h_1) \cdot Z_{\Lambda_N}^{\beta/2}(h_2). \quad (2.10)$$

Demonstração.

A demonstração deste lema é uma consequência das igualdades obtidas durante a demonstração do Lema A.

Como o produto interno é invariante por rotação, então, para a transformação T definida em (2.7), temos que

$$\mathbb{Z}_N^\beta(\mathbf{h}) = \sum_{S \in \mathbb{W}_N} \exp \left[\beta \left(\sum_{1 \leq i < j \leq N} V(j-i) \cdot \langle TX_i, TX_j \rangle + \langle T\mathbf{h}, TS_N \rangle \right) \right]. \quad (2.11)$$

Na demonstração do Lema A, vimos que $\langle T\mathbf{h}, TS_N \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N [\sigma_i h_1 + \tilde{\sigma}_i h_2]$ e $\langle TX_i, TX_j \rangle = \frac{1}{2}(\sigma_i \sigma_j + \tilde{\sigma}_i \tilde{\sigma}_j)$. Substituindo ambos os resultados na igualdade acima e separando os somatórios, temos que

$$\begin{aligned} \mathbb{Z}_N^\beta(\mathbf{h}) &= \sum_{\sigma \in \Sigma_N} \sum_{\tilde{\sigma} \in \Sigma_N} \exp \frac{\beta}{2} \left(\sum_{1 \leq i < j \leq N} V(j-i)(\sigma_i \sigma_j + \tilde{\sigma}_i \tilde{\sigma}_j) + \sum_{i=1}^N (\sigma_i h_1 + \tilde{\sigma}_i h_2) \right) \\ &= \sum_{\sigma \in \Sigma_N} \exp \left(-\frac{\beta}{2} H_{\Lambda_N}^h(\sigma) \right) \cdot \sum_{\tilde{\sigma} \in \Sigma_N} \exp \left(-\frac{\beta}{2} H_{\Lambda_N}^h(\tilde{\sigma}) \right) \\ &= Z_{\Lambda_N}^{\beta/2}(h_1) \cdot Z_{\Lambda_N}^{\beta/2}(h_2), \end{aligned}$$

provando-se assim o resultado. \square

2.4 Ausência de Transição de Fase

No estudo do modelo de Ising unidimensional, vimos que não ocorre uma transição de fase com respeito à descontinuidade da magnetização quando o campo externo h é não-nulo. O modelo de polímeros bidimensional herda esta propriedade do modelo de Ising unidimensional e não possui transição de fase difusiva-balística, quando o drift \mathbf{h} é não-nulo. O ponto central para o comportamento semelhante entre os dois modelos são os resultados apresentados na Seção 2.3, mais especificamente, o Lema B.

O Teorema A garante que para qualquer $\beta > 0$, o modelo de polímeros bidimensional apresenta comportamento balístico, ou seja, uma configuração espacial esticada na direção do drift $\mathbf{h} \neq 0$.

Teorema A.

Considere a função interação V ferromagnética e somável e $\beta > 0$. Se $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^2$ é tal que $h_1 = \langle \mathbf{h}, e_1 - e_2 \rangle > 0$ e $h_2 = \langle \mathbf{h}, e_1 + e_2 \rangle > 0$, então existe uma constante positiva $C(\beta, \mathbf{h})$ tal que

$$C(\beta, \mathbf{h}) \leq \frac{\mathbb{E}_N^{\beta, \mathbf{h}}[\|S_N\|^2]}{N^2}.$$

Mais precisamente,

$$C(\beta, \mathbf{h}) = \frac{1}{4} \cdot \min_{h \in \{h_1, h_2\}} \left\{ \frac{\sinh^2(\frac{\beta}{2}h)}{\sinh^2(\frac{\beta}{2}h) + e^{-2\beta V(1)}} \right\}.$$

Demonstração.

Considere $\langle \cdot \rangle_{\Lambda_N, nn}^{\beta, h}$ a esperança com respeito à medida de Gibbs do modelo de Ising de primeiros vizinhos com condição externa livre, apresentado no Exemplo 1.1. Temos que

$$\langle \sigma_i \rangle_{\Lambda_N, nn}^{\beta, h} \langle \sigma_j \rangle_{\Lambda_N, nn}^{\beta, h} \leq \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda_N, nn}^{\beta, h} \leq \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda_N}^{\beta, h}. \quad (2.12)$$

A desigualdade à esquerda em (2.12) segue da desigualdade FKG, apresentada no Teorema 1.4 e a desigualdade à direita é consequência da correlação entre spins ser monótona não-decrescente com respeito à interação V , conforme apresentado no item (c) da Proposição 1.1.

No Exemplo 1.3 mostramos que a magnetização do modelo de Ising de primeiros vizinhos é tal que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \langle \sigma_i \rangle_{\Lambda_N, nn}^{\beta, h} = m^{nn}(\beta, h) = \frac{\sinh(\beta h)}{\sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta V(1)}}}.$$

De acordo com o limite acima, para os campos externos h_1 e h_2 , dado $\varepsilon > 0$, existem $N_1, N_2 \in \mathbb{N}$, tais que

$$\left| \langle \sigma_i \rangle_{\Lambda_N, nn}^{\beta, h_n} - m^{nn}(\beta, h_n) \right| < \varepsilon, \quad \text{para } N > N_n \text{ e } n = 1, 2.$$

Tomando $N_0 = \max\{N_1, N_2\}$ e ε suficientemente pequeno, temos que

$$\frac{1}{2} \cdot \min_{h \in \{h_1, h_2\}} m^{nn}(\beta, h) < \min_{h \in \{h_1, h_2\}} \langle \sigma_i \rangle_{\Lambda_N, nn}^{\beta, h} \text{ para } N \geq N_0.$$

Multiplicando os termos correspondentes da desigualdade acima e aplicando a desigualdade (2.12), obtemos

$$\begin{aligned} \frac{1}{4} \cdot \min_{h \in \{h_1, h_2\}} \left[m^{nn} \left(\frac{\beta}{2}, h \right) \right]^2 &\leq \min_{h \in \{h_1, h_2\}} \langle \sigma_i \rangle_{\Lambda_N, nn}^{\frac{\beta}{2}, h} \langle \sigma_j \rangle_{\Lambda_N, nn}^{\frac{\beta}{2}, h} \\ &\leq \min_{h \in \{h_1, h_2\}} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda_N}^{\frac{\beta}{2}, h} \\ &\leq \frac{1}{2} \left[\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda_N}^{\frac{\beta}{2}, h_1} + \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda_N}^{\frac{\beta}{2}, h_2} \right]. \end{aligned}$$

Finalmente, utilizando o Lema B, temos

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_N^{\beta, \mathbf{h}}[\|S_N\|^2] &= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \left[\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda_N}^{\frac{\beta}{2}, h_1} + \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda_N}^{\frac{\beta}{2}, h_2} \right] \\ &\geq \frac{1}{4} \sum_{i,j=1}^N \min_{h \in \{h_1, h_2\}} \left[m^{nn} \left(\frac{\beta}{2}, h \right) \right]^2 \\ &= \frac{N^2}{4} \min_{h \in \{h_1, h_2\}} \left[m^{nn} \left(\frac{\beta}{2}, h \right) \right]^2,\end{aligned}$$

que conclui a prova do teorema. \square

2.5 Transição de fase: $\mathbf{h}=0$

Nesta seção consideraremos o drift $\mathbf{h} = 0$ e a função interação V tal que

$$V(j-i) = \frac{1}{(j-i)^\alpha}, \quad \text{para } 1 < \alpha \leq 2. \quad (2.13)$$

Considerando-se o modelo de Ising com a interação de longo alcance como em (2.13) e campo externo $h = 0$, o resultado apresentado no item (c) do Teorema 1.6 garante a existência de uma constante $\beta_c < \infty$ tal que a magnetização espontânea do modelo de Ising unidimensional satisfaz

$$m(\beta, +) \begin{cases} = 0, & \text{se } \beta < \beta_c \\ > 0, & \text{se } \beta > \beta_c, \end{cases}$$

ou seja, o modelo apresenta uma transição de fase de primeira ordem. No Teorema B prova-se uma transição de fase difusiva-balística para o modelo de polímeros bidimensional em que temperatura inversa crítica coincide com β_c em que ocorre a transição de fase de primeira ordem do modelo de Ising. A demonstração do Teorema B também utiliza o Lema B e garante que o modelo de polímeros bidimensional apresenta comportamento difusivo quando $\beta < \beta_c$ e esta descrição se altera instantaneamente quando $\beta > \beta_c$, exibindo comportamento balístico.

Um resultado da mesma natureza foi provado em [30]. Considerando o modelo de polímeros bidimensional

$$\tilde{\mathbb{H}}_N(S) = - \sum_{0 \leq i < j \leq N} |i-j|^{-\alpha} \|S_i - S_j\|^2 \quad \text{onde } 3 < \alpha \leq 4,$$

provou-se a existência de constantes positivas $\beta_1 \neq \beta_2$ tais que ocorre uma transição de fase, apresentando um comportamento difusivo quando $\beta < \beta_1$ e um comportamento balístico, quando $\beta > \beta_2$, porém não foi possível determinar o comportamento do modelo para $\beta \in [\beta_1, \beta_2]$. Os autores não descartaram inclusive a possibilidade do modelo ser superdifusivo neste intervalo. O resultado de transição de fase difusiva-balística para o modelo de polímeros considerado neste trabalho é mais completa, já que ficou provada a existência de uma única constante β_c separando o modelo em dois regimes, sendo difusivo, para $0 < \beta < \beta_c$ e balístico para $\beta > \beta_c$. O ponto β_c em que ocorre a mudança de comportamento do modelo de polímeros coincide com o ponto β_c em que ocorre a transição de fase de primeira ordem no modelo de Ising unidimensional, ou seja, o ínfimo dos valores de β para os quais a magnetização espontânea é positiva, considerando-se também a interação de longo alcance como em (2.13) e o campo externo nulo, conforme provado em [9] e [12]. A unicidade do ponto de transição de fase caracteriza o Teorema B como um resultado de transição de fase genuíno, segundo a literatura na área.

O resultado a seguir, provado em [1], será utilizado na demonstração do Teorema B.

Lema 2.1. *Considere o modelo de Ising ferromagnético com interação invariante por translação, ou seja, $V_{ij} = V(j - i)$, satisfazendo*

$$V(n) \cdot |n|^s \longrightarrow k, \quad (2.14)$$

onde k é uma constante positiva e finita e $s > 1$, sempre que a magnetização espontânea $m(\beta, +)$ é nula. Então, a correlação entre spins do modelo de Ising unidimensional a volume infinito satisfaz

$$\frac{C(\beta)}{|j - i|^s} \leq \langle \sigma_i \sigma_j \rangle^{\beta, h} \leq \frac{C'(\beta)}{|j - i|^s},$$

onde $C(\beta) > 0$ e $C'(\beta) < \infty$.

Teorema B.

Considere o modelo de polímeros aleatórios definido em \mathbb{W}_N e $V(j - i)$ dado por (2.13) com $1 < \alpha \leq 2$ fixado. Se $h = 0$, então existe $\beta_c \in (0, \infty)$ e

números positivos, $m(\beta, +)$, $K(\alpha, \beta)$ tais que

$$\frac{1}{2}m^2(\beta, +) \leq \frac{1}{N^2}\mathbb{E}_N^{2\beta,0}[\|S_N\|^2] \leq 1, \quad \forall \beta \in (\beta_c, +\infty) \quad (2.15)$$

e

$$1 \leq \frac{1}{N}\mathbb{E}_N^{2\beta,0}[\|S_N\|^2] \leq K(\alpha, \beta), \quad \forall \beta \in (0, \beta_c) \quad (2.16)$$

Demonstração.

O lado direito da desigualdade (2.15) é imediato. Verifiquemos então a desigualdade à esquerda. Considerando-se a interação V de longo alcance com $1 < \alpha \leq 2$, o item (c) do Teorema 1.6 garante a existência de uma constante não-trivial β_c tal que o modelo de Ising de longo alcance com acoplamento $V(j-i)$, tem magnetização espontânea $m(\beta, +) > 0$, para todo $\beta > \beta_c$.

Pelo Lema 1.4, tem-se que

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle^{\beta,0} = \frac{1}{2} \left[\langle \sigma_i \sigma_j \rangle^{\beta,0,+} + \langle \sigma_i \sigma_j \rangle^{\beta,0,-} \right], \quad (2.17)$$

onde $\langle \cdot \rangle^{\beta,0,\pm} = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \cdot \rangle_{\Lambda_N}^{\beta,0,\pm}$ e os valores esperados são com respeito à medida de Gibbs do modelo de Ising unidimensional com condição externa ± 1 , respectivamente. Então, utilizando a desigualdade FKG em (2.17) obtém-se

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle^{\beta,0} &\geq \frac{1}{2} \left[\langle \sigma_i \rangle^{\beta,0,+} \langle \sigma_j \rangle^{\beta,0,+} + \langle \sigma_i \rangle^{\beta,0,-} \langle \sigma_j \rangle^{\beta,0,-} \right] \\ &= m^2(\beta, +), \end{aligned} \quad (2.18)$$

onde (2.18) segue de $m(\beta, +) = \langle \sigma_i \rangle^{\beta,0,+} = -\langle \sigma_i \rangle^{\beta,0,-}$, conforme o item (b) do Lema 1.3.

Como $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda_N}^{\beta,0} \uparrow \langle \sigma_i \sigma_j \rangle^{\beta,0}$, existe $N_0 \in \mathbb{N}$ tal que para todo $N \geq N_0$,

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda_N}^{\beta,0} \geq \frac{1}{2} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle^{\beta,0},$$

que implica, juntamente com o Lema B, na prova da desigualdade (2.15), pois

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_N^{2\beta,0}[\|S_N\|^2] &= \sum_{i,j=1}^N \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda_N}^{\beta,0} \\ &\geq \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \langle \sigma_i \sigma_j \rangle^{\beta,0} \\ &\geq \frac{1}{2} m^2(\beta, +) N^2, \quad \forall N > N_0, \end{aligned}$$

sempre que $\beta > \beta_c$.

Veamos agora a prova do comportamento difusivo do modelo em altas temperaturas ($0 < \beta < \beta_c$). Primeiramente, provaremos que existem constantes positivas $0 < \tilde{C}(\beta) \leq C'(\beta) < +\infty$ tais que a função bivariada $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda_N}^\beta$ com condição de fronteira livre é limitada uniformemente em Λ_N como se segue:

$$\frac{\tilde{C}(\beta)}{|i-j|^\alpha} \leq \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda_N}^{\beta,0} \leq \frac{C'(\beta)}{|i-j|^\alpha}, \quad \text{para } 0 < \beta < \beta_c. \quad (2.19)$$

O lado direito da desigualdade (2.19) é uma aplicação do Lema 2.1. De fato, $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda_N}^{\beta,0} \uparrow \langle \sigma_i \sigma_j \rangle^{\beta,0}$ e considerando $0 < \beta < \beta_c$, a magnetização espontânea $m(\beta, +)$ é nula, segundo o item (d) do Teorema 1.6 e a condição (2.14) no Lema 2.1 é satisfeita para $s = \alpha \in (1, 2]$, para a constante $k = 1$.

O lado esquerdo em (2.19) é uma consequência da monotonicidade da correlação com respeito à interação (Proposição 1.1, item (c)). Com efeito, para cada par de sítios $i < j \in \Lambda_N$, considere o modelo de Ising com sítios em Λ_N , cuja interação

$$J_{kl} = \begin{cases} (l-k)^{-\alpha}, & \text{se } k=i \text{ e } l=j \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases}$$

ou seja, a interação só acopla os sítios i e j e se anula para todos os outros sítios. Se $\langle \cdot \rangle_{\Lambda_N, J}^{\beta,0}$ é a esperança com respeito ao modelo de Ising com interação J_{kl} , então, pelo item (c) da Proposição 1.1, temos

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda_N}^{\beta,0} &\geq \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda_N, J}^{\beta,0} \\ &= \sum_{\sigma_i = \pm 1} \sum_{\sigma_j = \pm 1} \sigma_i \sigma_j \exp\left(\frac{\beta \sigma_i \sigma_j}{|i-j|^\alpha}\right) \cdot \left[\sum_{\sigma_i = \pm 1} \sum_{\sigma_j = \pm 1} \exp\left(\frac{\beta \sigma_i \sigma_j}{|i-j|^\alpha}\right) \right]^{-1} \\ &= \frac{2 \exp(\beta|i-j|^{-\alpha}) - 2 \exp(-\beta|i-j|^{-\alpha})}{2 \exp(\beta|i-j|^{-\alpha}) + 2 \exp(-\beta|i-j|^{-\alpha})} \\ &= \tanh\left(\frac{\beta}{(j-i)^\alpha}\right) \\ &\geq \frac{\tanh \beta_c}{\beta_c} \cdot \frac{\beta}{(j-i)^\alpha}, \quad \forall 0 < \beta < \beta_c. \end{aligned} \quad (2.20)$$

A desigualdade (2.20) é consequência da concavidade da função $\tanh(\beta)$ (veja Figura 2.3)

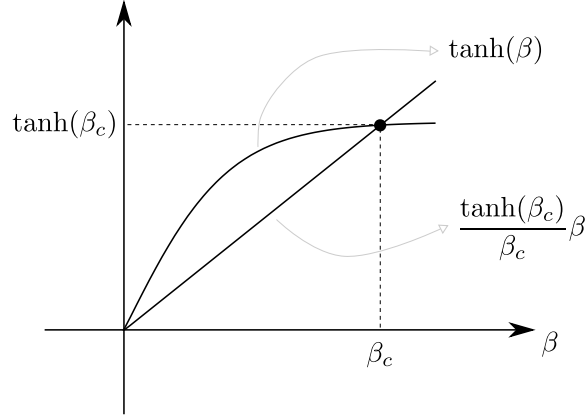


Figura 2.3: $\tanh \beta$ é côncava para $\beta > 0$

Considerando-se $\tilde{C}(\beta) = (\tanh(\beta_c) \cdot \beta)/\beta_c$, o lado esquerdo de (2.19) também está provado.

Reescrevendo-se a distância média quadrática em termos da correlação do modelo de Ising, conforme apresentado no Lema B, temos que

$$\mathbb{E}_N^{2\beta,0}[\|S_N\|^2] = \sum_{i,j=1}^N \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda_N}^{\beta,0} = N + \sum_{1 \leq i < j \leq N} 2 \langle \sigma_i \sigma_j \rangle_{\Lambda_N}^{\beta,0}.$$

Utilizando-se as desigualdades em (2.19), obtém-se, $\forall 0 < \beta < \beta_c$,

$$N + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \frac{2\tilde{C}(\beta)}{|i-j|^\alpha} \leq \mathbb{E}_N^{2\beta,0}[\|S_N\|^2] \leq N + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \frac{2C'(\beta)}{|i-j|^\alpha}. \quad (2.21)$$

Sabendo que $1 \leq \sum_{1 \leq i < j \leq N} \frac{1}{|i-j|^\alpha} \leq N\zeta(\alpha)$, onde ζ é a função Zeta de Riemann, substituindo em (2.21), tem-se

$$N \leq N + 2\tilde{C}(\beta) \leq \mathbb{E}_N^{2\beta,0}[\|S_N\|^2] \leq N + 2N\zeta(\alpha)C'(\beta), \quad \forall 0 < \beta < \beta_c.$$

Dividindo cada termo da desigualdade acima por N , conclui-se a demonstração da desigualdade (2.16), onde $K(\alpha, \beta) = 1 + 2\zeta(\alpha)C'(\beta)$. \square

Capítulo 3

Teorema do Limite Central para o Modelo de Polímeros

3.1 Introdução

O objetivo deste capítulo é apresentar um Teorema do Limite Central para o modelo de polímeros bidimensional definido através do Hamiltoniano (2.1).

Resultados em [25] estabelecem que sob hipótese de C^2 -regularidade, que será definida na Seção 3.2, uma família de funções $\{P_N\}_{N=1}^\infty$ possui comportamento assintoticamente Gaussiano.

Para obter o Teorema do Limite Central desejado, é necessário identificar a sequência $\{P_N\}_{N=1}^\infty$ com as medidas de Gibbs $\{\mathbb{P}_N^{\beta, \mathbf{h}}\}_{N=1}^\infty$, adequadamente definidas no mesmo espaço mensurável. Na Seção 3.3, definimos o modelo de polímeros a volume finito com condição externa e em seguida definimos as extensões de cada uma das medidas de Gibbs para o mesmo espaço mensurável. A verificação da condição de C^2 -regularidade para o modelo de polímeros é feita na Seção 3.4 e o método utilizado consiste em escrever o funcional pressão do modelo de polímeros bidimensional em termos da energia livre do modelo de Ising. Os resultados apresentados na Seção 1.6 são essenciais para a provar o teorema assintótico desejado.

3.2 Condição de Regularidade

Teoremas centrais de limite surgem de necessidades em estudos estatísticos. Um dos objetivos do trabalho [25] é estabelecer um Teorema do Limite Central para variáveis aleatórias dependentes, especialmente para aqueles decorrentes de processos de Markov e de sistemas de mecânica estatística.

Definição 3.1 (condição de C^2 -regularidade). *Dizemos que uma sequência de medidas de probabilidade $\{P_N\}_{N=1}^\infty$ em $(\mathbb{R}, \mathcal{B}(\mathbb{R}))$ satisfaz a condição de C^2 -regularidade, se existir o limite*

$$\begin{aligned}\Psi(t) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \Psi_N(t) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \int_{\mathbb{R}} \exp(txN) dP_N(x),\end{aligned}$$

e para alguma vizinhança $[-\delta, \delta]$ de zero, temos que $\Psi(\cdot) < \infty$ e

$$\Psi_N''(t) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \Psi''(t) \text{ uniformemente em } [-\delta, \delta].$$

O resultado a seguir afirma que a C^2 -regularidade implica em um Teorema do Limite Central. Sob a hipótese de C^2 -regularidade, os resultados em [25] permitem a obtenção do seguinte Teorema do Limite Central:

Teorema 3.1. *Seja $\nu_N(A) = P_N(x; [x - m(N)]\sqrt{N} \in A)$, onde $m(N) = \int_{\mathbb{R}} x dP_N(x) = \Psi_N'(0)$. Se $\{P_N\}_{N \rightarrow \infty}$ é C^2 -regular, então $\{\nu_N\}_{N=1}^\infty$ converge fracamente para a distribuição normal $\mathcal{N}(0, \Psi''(0))$.*

A questão que nos resta é checar a condição de C^2 -regularidade para o modelo de polímeros. Para isto, usaremos novamente uma identidade entre o modelo de polímeros e o modelo de Ising, o Teorema 1.9, que é uma consequência do Teorema de Lee-Yang e resultados clássicos de teoria de funções analíticas.

Dados β positivo, $\mathbf{v}, \mathbf{h} \in \mathbb{R}^2$ e $t \in \mathbb{R}$, considere o funcional pressão

$$\begin{aligned}\Psi^{\beta, \mathbf{h}}(t, \mathbf{v}) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \Psi_N^{\beta, \mathbf{h}}(t, \mathbf{v}) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \int_{\mathbb{W}_N} \exp[\beta t \langle S_N, \mathbf{v} \rangle] d\mathbb{P}_N^{\beta, \mathbf{h}}(S).\end{aligned}\tag{3.1}$$

Não podemos verificar diretamente a condição de C^2 -regularidade para a família de medidas $\{\mathbb{P}_N^{\beta, \mathbf{h}}\}_{N=1}^\infty$, pois cada probabilidade está definida em um espaço mensurável diferente. A extensão das medidas exige alguns detalhes que serão apresentados na próxima seção. Um fato interessante é que o funcional pressão definido sobre as extensões coincidirá com (3.1).

3.3 O Modelo de Polímeros com Condição Externa

Para obter o Teorema do Limite Central para o modelo de polímeros bidimensional, será necessário que todas as medidas de probabilidade na sequência $\{\mathbb{P}_N^{\beta, h}\}_{N=1}^\infty$ estejam definidas no mesmo espaço mensurável. A princípio, para cada $N \in \mathbb{N}$, a medida $\mathbb{P}_N^{\beta, h}$ está definida no espaço $(\mathbb{W}_N, \mathcal{B}(\mathbb{W}_N))$. O caminho natural seria portanto considerar para cada $N \in \mathbb{N}$ a extensão da medida $\mathbb{P}_N^{\beta, h}$ no espaço $(\mathbb{W}, \mathcal{B}(\mathbb{W}))$, onde

$$\mathbb{W} = \{S = (S_0, S_1, \dots) : S_i \in \mathbb{Z}^2, S_0 = 0 \text{ e } \|S_{i+1} - S_i\|_1 = 1\}.$$

Para que as extensões sejam bem definidas, precisamos considerar o modelo de polímeros com condição externa, e em seguida estender cada medida, assim como foi feito com o modelo de Ising unidimensional no Capítulo 1.

Para facilitar a definição do modelo de polímeros com condição externa, vamos redefinir de maneira conveniente cada espaço de configurações \mathbb{W}_N . Para cada $S = (S_0, S_1, \dots, S_N)$, seja $X_i = S_i - S_{i-1} \in \{\pm e_1, \pm e_2\}$ o i -ésimo passo do polímero, onde $i = 1, \dots, N$. Existe portanto uma relação biunívoca entre o espaço de configurações \mathbb{W}_N e o espaço

$$\begin{aligned} \mathbb{W}_N^* &= \{X = (X_1, X_2, \dots, X_N) : X_i \in \{\pm e_1, \pm e_2\}, \forall i = 1, \dots, N\} \\ &= \{\pm e_1, \pm e_2\}^{\Lambda_N}, \end{aligned}$$

onde $\Lambda_N = \{1, 2, \dots, N\}$. Fixando uma configuração $Y_j \in \{\pm e_1, \pm e_2\}$, para cada $j \in \Lambda_N^c = \mathbb{N} \setminus \Lambda_N$, temos que $Y = (Y_{N+1}, Y_{N+2}, \dots)$ determina uma condição externa. O modelo de polímeros bidimensional com condição externa

Y é definido através do Hamiltoniano

$$\begin{aligned}\mathbb{H}_{\Lambda_N}^{\mathbf{h},Y}(X) &= - \sum_{1 \leq i < j \leq N} V_{ij} \langle X_i, X_j \rangle - \sum_{i=1}^N \langle \mathbf{h}, X_i \rangle + \sum_{i=1}^N \sum_{j=N+1}^{\infty} V_{ij} \langle X_i, Y_j \rangle \\ &= - \sum_{1 \leq i < j \leq N} V_{ij} \langle X_i, X_j \rangle - \sum_{i=1}^N \langle \mathbf{h}_i, X_i \rangle,\end{aligned}$$

onde $\mathbf{h}_i = \mathbf{h} + \sum_{j=N+1}^{\infty} V_{ij} Y_j$. O modelo de polímeros definido através do Hamiltoniano (2.1) é o modelo com condição externa livre, que equivale a $Y_j \equiv 0, \forall j \in \Lambda_N^c$.

Para cada $X \in \mathbb{W}_N^*$, a medida da Gibbs do modelo de polímeros com condição externa Y é definida por

$$\mathbb{P}_N^{\beta, \mathbf{h}, Y}(X) = \frac{\exp(-\beta \mathbb{H}_N^{\mathbf{h}, Y}(X))}{Z_N^{\beta, Y}(\mathbf{h})},$$

onde $Z_N^{\beta, Y}(\mathbf{h})$ é a respectiva função de partição, dada por

$$Z_N^{\beta, Y}(\mathbf{h}) = \sum_{X \in \mathbb{W}_N^*} \exp \left[\beta \left(\sum_{1 \leq i < j \leq N} V(j-i) \cdot \langle X_i, X_j \rangle + \langle \mathbf{h}_i, S_N \rangle \right) \right]. \quad (3.2)$$

Os resultados de comparação entre o modelo de Ising e o modelo de polímeros, apresentados na Seção 2.3, consideram ambos os modelos com condição externa livre. Podem ser obtidos resultados de comparação análogos quando ambos os modelos possuem condição externa. Para o interesse deste capítulo, apresentaremos o seguinte resultado:

Lema D. *Considere $Z_N^{\beta, Y}(\mathbf{h})$ a função de partição definida em (3.2) e $Z_{\Lambda_N}^{\beta, \omega}(h)$ a função de partição definida em (1.7). Dados $h_1 = \langle \mathbf{h}, e_1 - e_2 \rangle$ e $h_2 = \langle \mathbf{h}, e_1 + e_2 \rangle$, para cada condição externa Y fixada, existem únicas condições externas ω e $\tilde{\omega}$ para o modelo de Ising tais que*

$$Z_N^{\beta, Y}(\mathbf{h}) = Z_{\Lambda_N}^{\frac{\beta}{2}, \omega}(h_1) \cdot Z_{\Lambda_N}^{\frac{\beta}{2}, \tilde{\omega}}(h_2). \quad (3.3)$$

Demonstração. Seguiremos as idéias da prova do Lema C. Aplicando a transformação T dada em (2.7) em $X = (X_1, \dots, X_N)$ e também para a condição

externa fixada $Y = (Y_{N+1}, Y_{N+2}, \dots)$, obtemos

$$\begin{aligned} TX_i &= \sigma_i \frac{e_1}{\sqrt{2}} + \tilde{\sigma}_i \frac{e_2}{\sqrt{2}}, \quad \forall i \in \Lambda_N \\ TY_j &= \omega_j \frac{e_1}{\sqrt{2}} + \tilde{\omega}_j \frac{e_2}{\sqrt{2}}, \quad \forall j \in \Lambda_N^c \end{aligned}$$

onde σ_i e $\tilde{\sigma}_i$ são variáveis aleatórias independentes assumindo valores em $\{-1, +1\}$, e ω_i e $\tilde{\omega}_i$ assumem valores em $\{-1, +1\}$ dependendo da condição externa fixada Y . Observe que

$$\langle TX_i, TY_j \rangle = \frac{1}{2}(\sigma_i \omega_j + \tilde{\sigma}_i \tilde{\omega}_j).$$

Assim como na demonstração do Lema A, verifica-se que

$$\mathbb{P}_N^{\beta, \mathbf{h}, Y}(S) = \mathbb{P}_N^{\beta, T\mathbf{h}, TY}(TS) = P_{\Lambda_N}^{\frac{\beta}{2}, h_1, \omega}(\sigma) P_{\Lambda_N}^{\frac{\beta}{2}, h_2, \tilde{\omega}}(\tilde{\sigma}).$$

Portanto, a função de partição se reescreve como

$$\begin{aligned} \mathbb{Z}_N^{\beta, Y}(\mathbf{h}) &= \sum_{X \in \mathbb{W}_N^*} \exp \left[\beta \left(\sum_{1 \leq i < j \leq N} V(j-i) \cdot \langle TX_i, TX_j \rangle + \langle T\mathbf{h}_i, TS_N \rangle \right) \right] \\ &= \sum_{\sigma, \tilde{\sigma} \in \Sigma_N} \exp \frac{\beta}{2} \left(\sum_{1 \leq i < j \leq N} V(j-i)(\sigma_i \sigma_j + \tilde{\sigma}_i \tilde{\sigma}_j) + \sum_{i=1}^N (\sigma_i h_1 + \tilde{\sigma}_i h_2) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{i=1}^N \sum_{j=N+1}^{\infty} V(j-i)(\sigma_i \omega_j + \tilde{\sigma}_i \tilde{\omega}_j) \right) \\ &= \sum_{\sigma \in \Sigma_N} \exp \left(-\frac{\beta}{2} H_{\Lambda_N}^{h, \omega}(\sigma) \right) \cdot \sum_{\tilde{\sigma} \in \Sigma_N} \exp \left(-\frac{\beta}{2} H_{\Lambda_N}^{h, \tilde{\omega}}(\tilde{\sigma}) \right) \\ &= Z_{\Lambda_N}^{\frac{\beta}{2}, \omega}(h_1) \cdot Z_{\Lambda_N}^{\frac{\beta}{2}, \tilde{\omega}}(h_2), \end{aligned}$$

provando assim o resultado. \square

Para definir a extensão de $\mathbb{P}_N^{\beta, \mathbf{h}, Y}$ para uma medida em $(\mathbb{W}^*, \mathcal{B}(\mathbb{W}^*))$, onde $\mathbb{W}^* = \{\pm e_1, \pm e_2\}^{\mathbb{N}}$, é necessário que a medida de Gibbs seja compatível com a condição externa Y . Considere então

$$B_{\Lambda_N}^Y = \{X \in \mathbb{W}^* : X_j = Y_j, \text{ para cada } j \in \Lambda_N^c\}$$

e π_N a projeção de \mathbb{W}^* em \mathbb{W}_N^* , ou seja, $(\pi_N(X))_i = X_i$, para cada $i \in \Lambda_N$. Para cada $A \in \mathcal{B}(\mathbb{W}^*)$, a extensão $\bar{\mathbb{P}}_N^{\beta, \mathbf{h}, Y}$ da medida de Gibbs $\mathbb{P}_N^{\beta, \mathbf{h}, Y}$ é definida por

$$\bar{\mathbb{P}}_N^{\beta, \mathbf{h}, Y}(A) = \mathbb{P}_N^{\beta, \mathbf{h}, Y}(\pi_N(A \cap B_{\Lambda_N}^Y)) = \sum_{X \in \pi_N(A \cap B_{\Lambda_N}^Y)} \mathbb{P}_N^{\beta, \mathbf{h}, Y}(X).$$

Temos agora que a família de medidas $\{\bar{\mathbb{P}}_N^{\beta, \mathbf{h}, Y}\}_{N=1}^{\infty}$ está definida no mesmo espaço mensurável $(\mathbb{W}^*, \mathcal{B}(\mathbb{W}^*))$, para qualquer N . Então, o funcional pressão com condição externa é

$$\begin{aligned} \Psi^{\beta, \mathbf{h}, Y}(t, \mathbf{v}) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \Psi_N^{\beta, \mathbf{h}, Y}(t, \mathbf{v}) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \int_{\mathbb{W}^*} \exp[\beta t \langle S_N, \mathbf{v} \rangle] d\bar{\mathbb{P}}_N^{\beta, \mathbf{h}, Y}(X). \end{aligned} \quad (3.4)$$

3.4 Teorema do Limite Central

Para obter o Teorema do Limite Central para o modelo de polímeros bidimensional, basta provar que a sequência de medidas de probabilidade $\{\bar{\mathbb{P}}_N^{\beta, \mathbf{h}, Y}\}_{N=1}^{\infty}$ no espaço mensurável $(\mathbb{W}^*, \mathcal{B}(\mathbb{W}^*))$, satisfaz a condição de C^2 -regularidade apresentada na Definição 3.1, aplicando-se o Teorema 3.1.

Para cada $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^2$, a função $F_N^{\mathbf{v}}(X) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle X_i, \mathbf{v} \rangle = \frac{1}{N} \langle S_N, \mathbf{v} \rangle$ é contínua e só depende das N primeiras coordenadas de $X \in \mathbb{W}^*$. Então, a integral sobre $\bar{\mathbb{P}}_N^{\beta, \mathbf{h}, Y}$ em (3.4) coincide com a integral sobre $\mathbb{P}_N^{\beta, \mathbf{h}, Y}$ e podemos escrever

$$\begin{aligned} \Psi^{\beta, \mathbf{h}, Y}(t, \mathbf{v}) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \int_{\mathbb{W}_N^*} \exp[\beta t \langle S_N, \mathbf{v} \rangle] d\mathbb{P}_N^{\beta, \mathbf{h}, Y}(X), \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \left(\frac{\mathbb{Z}_N^{\beta, Y}(\mathbf{h} - t\mathbf{v})}{\mathbb{Z}_N^{\beta, Y}(\mathbf{h})} \right) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \left[\log \left(\mathbb{Z}_N^{\beta, Y}(\mathbf{h} - t\mathbf{v}) \right) - \log \left(\mathbb{Z}_N^{\beta, Y}(\mathbf{h}) \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.5)$$

A partir da equação (3.5), podemos escrever o funcional pressão $\Psi^{\beta, \mathbf{h}, Y}$ em termos da função de partição do modelo de Ising, aplicando o Lema D. Consequentemente, $\Psi^{\beta, \mathbf{h}, Y}$ pode ser escrita em termos da energia livre $f(\beta, h)$

do modelo de Ising, que independe da condição externa, conforme foi provado no Lema 1.1. O funcional pressão herda esta propriedade da energia livre e também independe da condição externa Y .

Lema E. *Para qualquer $\beta > 0$, $\mathbf{h}, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^2$ e $t \in \mathbb{R}$, o funcional pressão $\Psi^{\beta, \mathbf{h}, Y}(t, \mathbf{v})$ existe, independe da condição externa Y e coincide com $\Psi^{\beta, \mathbf{h}}(t, \mathbf{v})$ dado em (3.1). Em particular, para $v_1 = \langle v, e_1 - e_2 \rangle$ e $v_2 = \langle v, e_1 + e_2 \rangle$, temos*

$$\Psi^{\beta, \mathbf{h}, Y}(t, \mathbf{v}) = \Psi^{\beta, \mathbf{h}}(t, \mathbf{v}) = -\beta \sum_{i=1}^2 \left[f\left(\frac{\beta}{2}, h_i - tv_i\right) - f\left(\frac{\beta}{2}, h_i\right) \right], \quad (3.6)$$

onde $f(\beta, h)$ é a energia livre, definida em (1.22).

Demonstração.

$$\begin{aligned} \Psi^{\beta, \mathbf{h}, Y}(t, \mathbf{v}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} & \left[\log Z_{\Lambda_N}^{\frac{\beta}{2}, \omega}(h_1 - tv_1) + \log Z_{\Lambda_N}^{\frac{\beta}{2}, \tilde{\omega}}(h_2 - tv_2) \right. \\ & \left. - \log Z_{\Lambda_N}^{\frac{\beta}{2}, \omega}(h_1) - \log Z_{\Lambda_N}^{\frac{\beta}{2}, \tilde{\omega}}(h_2) \right]. \end{aligned}$$

Pela definição da energia livre, temos

$$\begin{aligned} \Psi^{\beta, \mathbf{h}, Y}(t, \mathbf{v}) &= -\beta \sum_{i=1}^2 \left[f\left(\frac{\beta}{2}, h_i - tv_i, \omega\right) - f\left(\frac{\beta}{2}, h_i, \tilde{\omega}\right) \right] \\ &= -\beta \sum_{i=1}^2 \left[f\left(\frac{\beta}{2}, h_i - tv_i\right) - f\left(\frac{\beta}{2}, h_i\right) \right]. \end{aligned}$$

O Lema 1.1 garante que $f(\beta, h)$ existe para quaisquer $\beta > 0$ e h real, e independe da condição externa. Então o funcional pressão $\Psi^{\beta, \mathbf{h}, Y}(t, \mathbf{v})$ existe, para qualquer β positivo, $\mathbf{h}, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^2$ e $t \in \mathbb{R}$ e também independe da condição externa Y . Além disso, desenvolvendo de maneira análoga o limite $\Psi^{\beta, \mathbf{h}}(t, \mathbf{v})$ dado em (3.1) e utilizando o Lema C, este valor também coincide com a expressão em termos da energia livre dada em (3.6). \square

O Lema E garante que é suficiente provar a condição de C^2 -regularidade para o funcional pressão $\Psi^{\beta, \mathbf{h}}(t, \mathbf{v})$ definido para a família $\{\mathbb{P}_N^{\beta, \mathbf{h}}\}_{N=1}^{\infty}$. O item (a) da Proposição 1.3 garante que $f(\beta, h)$ é continuamente diferenciável para $h \neq 0$. Então, a expressão (3.6) garante que $\Psi^{\beta, \mathbf{h}}(t, \mathbf{v})$ é continuamente

diferenciável em t , para $h_1 - tv_1 \neq 0$ e $h_2 - tv_2 \neq 0$, e portanto é continuamente diferenciável em uma vizinhança de $t = 0$, desde que $h_1, h_2 \neq 0$. Para concluir a verificação da hipótese de C^2 -regularidade, resta provar que existem as derivadas de segunda ordem com respeito a $t = 0$ e

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi_N^{\beta, \mathbf{h}}(t, \mathbf{v}) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi^{\beta, \mathbf{h}}(t, \mathbf{v}),$$

uniformemente, em alguma vizinhança de $t=0$. Isto será uma consequência dos dois resultados seguintes

Lema F. *O funcional pressão $\Psi^{\beta, \mathbf{h}}(z, \mathbf{v})$ é analítico $\forall z \in \mathbb{C}$ tal que $\text{Re}(z) \neq h_i/v_i$, para $i = 1, 2$. Além disso, a convergência de $\Psi^{\beta, \mathbf{h}}(z, \mathbf{v})$ é localmente uniforme em z .*

Demonstração. Considerando que z é um número complexo, para decompor $\Psi_N^{\beta, \mathbf{h}}(z, \mathbf{v})$ em termos da função de partição do modelo de Ising, usaremos as seguintes identidades em [19]:

$$\begin{aligned} \log(zw) &= \log z + \log w + 2\pi i \mathcal{K}(\log z + \log w) \\ \log(z/w) &= \log z + \log w + 2\pi i \mathcal{K}(\log z - \log w) \end{aligned}$$

onde \log denota o ramo principal do logaritmo e

$$\mathcal{K}(x + iy) = \begin{cases} 1, & \text{se } -3\pi < y \leq -\pi, \\ 0, & \text{se } -\pi < y \leq \pi, \\ -1, & \text{se } \pi < y \leq 3\pi, \\ -n, & \text{se } (2n-1)\pi < y \leq (2n+1)\pi. \end{cases}$$

O funcional pressão $\Psi^{\beta, \mathbf{h}}(z, \mathbf{v})$ é dado por

$$\begin{aligned} \Psi^{\beta, \mathbf{h}}(z, \mathbf{v}) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \Psi_N^{\beta, \mathbf{h}}(z, \mathbf{v}) \\ &= -\beta \left[f\left(\frac{\beta}{2}, h_1 - zv_1\right) + f\left(\frac{\beta}{2}, h_2 - zv_2\right) - f\left(\frac{\beta}{2}, h_1\right) - f\left(\frac{\beta}{2}, h_2\right) \right] \\ &\quad + \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{2\pi i}{N} \left[\mathcal{K}\left(\log Z_{\Lambda_N}^{\beta/2}(h_1 + zv_1) + \log Z_{\Lambda_N}^{\beta/2}(h_2 + zv_2)\right) \right. \\ &\quad \left. + \mathcal{K}\left(\log Z_N^\beta(h + zv)\right) \right]. \\ &= -\beta \left[f\left(\frac{\beta}{2}, h_1 - zv_1\right) + f\left(\frac{\beta}{2}, h_2 - zv_2\right) - f\left(\frac{\beta}{2}, h_1\right) - f\left(\frac{\beta}{2}, h_2\right) \right]. \end{aligned}$$

Pelo Teorema 1.9, $f(\beta, h)$ é analítica $\forall h \in \mathbb{C}$ tal que $Re(h) \neq 0$, portanto $\Psi^{\beta, \mathbf{h}}(z, \mathbf{v})$ é analítica em z sempre que $Re(h_1 + zv_1) \neq 0$ e $Re(h_2 + zv_2) \neq 0$, ou seja, $Re(z) \neq \frac{h_i}{v_i}$, para $i = 1, 2$. O Teorema 1.9 estabelece ainda a convergência localmente uniforme em z . \square

Lema 3.1. *Se a sequência de funções complexas*

$$\Psi_N(z) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \Psi(z),$$

uniformemente na região $\mathcal{D} \subset \mathbb{C}$ e cada função na sequência $\{\Psi_N(z)\}_{N=1}^{\infty}$ é analítica em \mathcal{D} , então para qualquer inteiro positivo k , a sequência de derivadas de ordem k

$$\Psi_N^{(k)}(z) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \Psi^{(k)}(z),$$

uniformemente nas partes compactas da região \mathcal{D} .

Demonstração. Seja $\bar{B}(a, r) \subset \mathcal{D}$. Existe um número $R > r$ tal que $\bar{B}(a, R) \subset \mathcal{D}$. Se γ é a circunferência $|z - a| = r$, então a fórmula integral de Cauchy permite escrever

$$\Psi_N^{(k)}(z) - \Psi^{(k)}(z) = \frac{k!}{2\pi i} \int_{\gamma} \frac{\Psi_N(w) - \Psi(w)}{(z - w)^{k+1}} dw,$$

para $z \in \bar{B}(a, r)$. Usando a estimativa de Cauchy,

$$|\Psi_N^{(k)}(z) - \Psi^{(k)}(z)| \leq \frac{k! M_N R}{(R - r)^{k+1}}, \quad \text{para } |z - a| \leq r, \quad (3.7)$$

onde $M_N = \sup\{|\Psi_N(w) - \Psi(w)| : |w - a| = R\}$. Como $\Psi_N \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \Psi$, então $\lim_{N \rightarrow \infty} M_N = 0$. Então, segue de (3.7) que $\Psi_N^{(k)} \rightarrow \Psi^{(k)}$ uniformemente em $\bar{B}(a, r)$. Agora, se $K \subset \mathcal{D}$ é um compacto arbitrário e $0 < r < d(K, \partial \mathcal{D})$, então existem $a_1, \dots, a_n \in K$ tais que $K \subset \cup_{j=1}^n B(a_j, r)$. Como $\Psi_N^{(k)} \rightarrow \Psi^{(k)}$ uniformemente em cada $\bar{B}(a_j, r)$, a convergência é uniforme em K . \square

Obtemos portanto o seguinte Teorema do Limite Central para o modelo de polímeros.

Teorema C. *Considere que as interações são ferromagnéticas, invariantes por translação e somáveis, ou seja, $V_{ij} = V(|i - j|) > 0$ e $\sum_{i \in \mathbb{N}} V(i) < \infty$. Considere ainda $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^2$ tais que $h_1 = \langle \mathbf{h}, e_1 - e_2 \rangle$ e $h_2 = \langle \mathbf{h}, e_1 + e_2 \rangle$ e um vetor fixado $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^2$ onde $v_1 = \langle \mathbf{v}, e_1 - e_2 \rangle$ e $v_2 = \langle \mathbf{v}, e_1 + e_2 \rangle$.*

Se $h_i/v_i \neq 0$, para $i = 1, 2$ então

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \left[\beta \langle S_N, \mathbf{v} \rangle - \mathbb{E}_N^{\beta, \mathbf{h}} \langle S_N, \mathbf{v} \rangle \right] \xrightarrow{\mathcal{D}} \mathcal{N} \left(0, \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi^{\beta, \mathbf{h}}(0, \mathbf{v}) \right),$$

onde " $\xrightarrow{\mathcal{D}}$ " indica convergência em distribuição.

Demonstração. A existência do funcional pressão $\Psi^{\beta, \mathbf{h}}(t, \mathbf{v})$ está provada no Lema E. Trocando a variável real t pela variável complexa $z \in \mathbb{C}$, expressamos o funcional pressão em termos da energia livre a volume finito do modelo de Ising unidimensional e concluimos através do Lema F que o funcional pressão é analítico em z , tal que $Re(z) \neq h_i/v_i$ para $i = 1, 2$. Como $h_i/v_i \neq 0$, para cada $i = 1, 2$, então o funcional pressão é analítico em uma vizinhança de z , tal que $Re(z) = 0$. Além disso,

$$\Psi_N^{\beta, \mathbf{h}}(z, \mathbf{v}) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \Psi^{\beta, \mathbf{h}, \mathbf{v}}(z), \text{ localmente uniformemente em } z.$$

O Lema 3.1 garante que as derivadas de $\Psi_N^{\beta, \mathbf{h}}(z, \mathbf{v})$ convergem uniformemente nos subconjuntos compactos da vizinhança de z , tal que $Re(z) = 0$. Temos portanto que a condição de C^2 -regularidade é satisfeita e obtemos um comportamento Gaussiano para o modelo de polímeros, de acordo com o Teorema 3.1. Observe que

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \Psi_N^{\beta, \mathbf{h}}(t, \mathbf{v}) &= \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{N} \log \int_{\mathbb{W}_N} \exp[\beta t \langle S_N, \mathbf{v} \rangle] d\mathbb{P}_N^{\beta, \mathbf{h}}(S) \right] \\ &= \frac{1}{N} \cdot \left(\frac{\int_{\mathbb{W}_N} \beta \langle S_N, \mathbf{v} \rangle \exp[\beta t \langle S_N, \mathbf{v} \rangle] d\mathbb{P}_N^{\beta, \mathbf{h}}(S)}{\int_{\mathbb{W}_N} \exp[\beta t \langle S_N, \mathbf{v} \rangle] d\mathbb{P}_N^{\beta, \mathbf{h}}(S)} \right) \end{aligned}$$

Derivando novamente com respeito a t ,

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi_N^{\beta, \mathbf{h}}(t, \mathbf{v}) = \frac{1}{N} \cdot \left[\frac{\int_{\mathbb{W}_N} (\beta \langle S_N, \mathbf{v} \rangle)^2 \exp[\beta t \langle S_N, \mathbf{v} \rangle] d\mathbb{P}_N^{\beta, \mathbf{h}}(S)}{\int_{\mathbb{W}_N} \exp[\beta t \langle S_N, \mathbf{v} \rangle] d\mathbb{P}_N^{\beta, \mathbf{h}}(S)} - \left(\frac{\int_{\mathbb{W}_N} \beta \langle S_N, \mathbf{v} \rangle \exp[\beta t \langle S_N, \mathbf{v} \rangle] d\mathbb{P}_N^{\beta, \mathbf{h}}(S)}{\int_{\mathbb{W}_N} \exp[\beta t \langle S_N, \mathbf{v} \rangle] d\mathbb{P}_N^{\beta, \mathbf{h}}(S)} \right)^2 \right] \quad (3.8)$$

Fazendo $t = 0$ em (3.8), obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi_N^{\beta, \mathbf{h}}(0, \mathbf{v}) &= \frac{1}{N} \left[\int_{\mathbb{W}_N} (\beta \langle S_N, \mathbf{v} \rangle)^2 d\mathbb{P}_N^{\beta, \mathbf{h}}(S) - \left(\int_{\mathbb{W}_N} \beta \langle S_N, \mathbf{v} \rangle d\mathbb{P}_N^{\beta, \mathbf{h}}(S) \right)^2 \right] \\ &= \frac{1}{N} \left[\mathbb{E}_N^{\beta, \mathbf{h}} (\beta \langle S_N, \mathbf{v} \rangle)^2 - \left(\mathbb{E}_N^{\beta, \mathbf{h}} (\beta \langle S_N, \mathbf{v} \rangle) \right)^2 \right] \\ &= \frac{1}{N} \mathbb{E}_N^{\beta, \mathbf{h}} \left[\beta \langle S_N, \mathbf{v} \rangle - \mathbb{E}_N^{\beta, \mathbf{h}} (\beta \langle S_N, \mathbf{v} \rangle) \right]^2, \end{aligned}$$

onde $\mathbb{E}_N^{\beta, \mathbf{h}}$ é o valor esperado, definido em (2.4). Concluimos portanto que

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \left[\beta \langle S_N, \mathbf{v} \rangle - \mathbb{E}_N^{\beta, \mathbf{h}} (\beta \langle S_N, \mathbf{v} \rangle) \right] \xrightarrow{\mathcal{D}} \mathbf{N} \left(0, \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi^{\beta, \mathbf{h}}(0, \mathbf{v}) \right).$$

□

Bibliografia

- [1] M. Aizenman, J. T. Chayes, L. Chayes, C. M. Newman. *Discontinuity of the magnetization in one-dimensional $1/|x - y|^2$ Ising and Potts models*, J. Statist. Phys. **50**, 1-40 (1988)
- [2] J. Brémont, J. L. Lebowitz, C.-E. Pfister *On the equivalence of boundary condition*, J. Statist. Phys. **21**, 573-582 (1979).
- [3] P. Buttà, A. Procacci, B. Scoppola. *Kac polymers*, J. Statist. Phys. **119**, Nos.3/4, 643-658 (2005)
- [4] S. Caracciolo, G. Parisi, A. Pelissetto. *Random Walks with short-range interaction and mean field behaviour*, J. Statist. Phys., **77**, Nos. 3/4, 519-543 (1994)
- [5] L. Chiarini, L. M. Cioletti, F. Fernandes. *Polinômios de Lee-Yang com Coeficientes Complexos*. Matemática Universitária-SBM, **52/53** (2014)
- [6] L. M. Cioletti, C. C. Y. Dorea, S. Vasconcelos da Silva *Diffusive-Ballistic Transition in Random Polymers with Drift and Repulsive Long-Range Interactions*, J. Statist. Phys., DOI: 10.1007/s10955-014-1021-z (2014)
- [7] P. Cupertino. *O Teorema de Lee-Yang*, (2004), <http://www.mat.ufmg.br/~lima/artigos/leeyang.pdf>, acessado em 05/06/2013.
- [8] H. Duminil-Copin, A. Hammond. *Self-Avoiding Walk is Sub-Ballistic*. Commun. Math. Phys. **324**, 401–423 (2013)
- [9] F. J. Dyson. *Existence of a phase-transition in a one-dimensional Ising ferromagnet*. Comm. Math. Phys. **12**, no. 2, 91-107 (1969)

- [10] Richard S. Ellis. *Entropy, Large Deviation and Statistical Mechanics*. Springer. (2005)
- [11] C. M. Fortuin, P. W. Kasteleyn, J. Ginibre. *Correlation inequalities on some partially ordered sets*. Commun. Math. Phys. **22**, 89–103 (1971).
- [12] J. Fröhlich, T. Spencer. *The phase transition in the one-dimensional Ising model with $1/r^2$ interaction energy*. Comm. Math. Phys. **84** no. 1, 87-101 (1982)
- [13] Hans-Otto Georgii. *Gibbs measures and phase transitions*. De Gruyter Studies in Mathematics 9. (2010)
- [14] R. B. Griffiths *Correlations in Ising ferromagnets*. I. J. Math. Phys. **8**, 478-483 (1967)
- [15] R. B. Griffiths *Correlations in Ising ferromagnets*. II. J. Math. Phys. **8**, 484-489 (1967)
- [16] R. B. Griffiths, C. A. Hurst, S. Sherman *Concavity of magnetization of an Ising ferromagnet in a positive external field*. J. Math. Phys. **11**, 790-795 (1970)
- [17] E. Ising. *Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus*. Z. Phys. **31**, 253-258 (1925)
- [18] R. B. Israel. *Convexity in the Theory of Lattice Gases*. Princeton University Press, Princeton. (1979)
- [19] D. J. Jeffrey, D. E. G Hare, R. M. Corless. *Unwinding the Branches of the Lambert W Function*. Math. Scientist **21**, 1-7 (1996)
- [20] D. G. Kelly, S. Sherman *General Griffiths' inequalities on correlations in Ising Ferromagnets*, J. Math. Phys. **9**, 466-484 (1968)
- [21] J. L. Lebowitz. *Coexistence of Phases in Ising Ferromagnets*, J. Statist. Phys., **16**, No. 6, 463-476 (1977)

- [22] T. D. Lee, C. N. Yang. *Statistical theory of equations of state and phase transitions, II. Lattice gas and Ising model*, Phys. Rev., **87**, 410-419 (1952)
- [23] W. Lenz. *Beitrag zum Verständnis der magnetischen Erscheinungen in festen Körpern*, Z. Physik, **21**, 613-615 (1920)
- [24] T. M. Liggett. *Interacting Particle Systems*. Classics in Mathematics, Springer, 1985.
- [25] W. Liming. *Moderate Deviations of Dependent Random Variables Related to CLT*, Ann. Probab., **23**, n.1, 420-445 (1995).
- [26] N. Madras, G. Slade. *The Self-Avoiding Walk*, Probability and its Applications. Birkhäuser, Boston (1993).
- [27] P. A. Pearce *Mean field bounds on the magnetization for ferromagnetic spin models*, J. Statist. Phys., **25**, 309-320 (1981).
- [28] R. F. Peierls *On Ising Models of Ferromagnetism*, Proc. Cambridge Philos. Soc., **32**, 477-481 (1936).
- [29] C. J. Preston *An Application of the GHS inequalities to show the absence of phase transitions for Ising spin systems*, Commun. Math. Phys., **35**, 253-255 (1974).
- [30] A. Procacci, R. Sanchis and B. Scoppola. *Diffusive-Ballistic Transition in Random Walks with Long-Range Self-Repulsion*, Lett. Math. Phys. **83**, 181-187 (2008).
- [31] D. Ruelle. *Statistical Mechanics - Rigorous Results*, World Scientific, Imperial College Press (2007).
- [32] D. Ruelle. *Thermodynamic Formalism*, Addison-Wesley, Reading, MA. (1978).
- [33] S. Sakai *On commutative normal *-derivations, II*. J. Funct. Anal. **21**, 203-208 (1976).

- [34] M. Suzuki. *Solution of Potts Model for Phase Transition*. Prog. Theor. Phys. 37 (1967)
- [35] E. C. Titchmarsh. *The Theory of Functions* Second Edition. Oxford Univ. Press, New York (1939).