Centro de Matemática da Universidade do Porto

Centro de Física do Porto

Curso Livre sobre Teoria do Campo

Aviso... Este texto é provisório e destina-se ao uso dos participantes do Curso Livre. Não reclama qualquer tipo de originalidade e pode conter erros. Agradeço qualquer tipo de crítica ou sugestão.

Entropia. Medidas de Gibbs

João Nuno Tavares[1]

Índice:

1 Informação e entropia

A Mecânica Estatística descreve *sistemas complexos* constituídos por um grande número de *"átomos"* em interacção cujos estados exactos não podem ser especificados justamente devido a essa complexidade. Um sistema é por isso descrito por uma medida de probabilidade (*macro-estado*) sobre o conjunto de todas as suas configurações possíveis (*micro-estados*). Em geral, a informação sobre o sistema é reduzida, e apenas dispômos de dados àcerca da sua temperatura, pressão, energia interna, etc... Estes dados são interpretados como médias de observáveis relativamente a certos macro-estados (medidas de probabilidade) embora possa haver vários macro-estados compatíveis com esses dados.

A questão é pois saber como devemos seleccionar o (macro-)estado "óptimo" e que sentido deve ser dado a essa escolha. O princípio adoptado é o chamado *"Princípio de Entropia Máxima"* - *"escolher o macro-estado que maximiza entropia sujeito apenas às restrições dos dados observados e apenas a estas"*.

Para definir entropia, começámos por definir uma medida de informação de tal forma que uma observação inesperada tenha um conteúdo de informação superior ao de uma observação esperada. Em particular, um acontecimento certo terá um conteúdo de informação nulo. Se

[1]Centro de Matemática da Universidade do Porto; jntavar@fc.up.pt; Work supported by *Fundação para a Ciência e a Tecnologia* (FCT) through the *Centro de Matemática da Universidade do Porto* (CMUP). Available as a PDF file from http://www.fc.up.pt/cmup.

observámos um acontecimento que tem uma probabilidade de ocorrer igual a p, associamos a esse acontecimento a quantidade de informação:

$$I(p) = \log \frac{1}{p}$$

de tal forma que $I(p) \to 0$, quando $p \to 1$ (usualmente o log toma-se na base 2).

Suponhámos agora que temos um sistema cujo conjunto de configurações possíveis é:

$$\Omega = \{\omega_i : \quad i = 1, \cdots, N\}$$

Suponhámos que p é uma medida de probabilidade em Ω, de tal forma que cada uma das configurações ω_i ocorre com probabilidade $p_i = p(\omega_i)$, $i = 1, \cdots, N$. A *quantidade de informação* média associada, chama-se *entropia de p* e é dada por:

$$\mathrm{Ent}(p) = \sum_{i=1}^{N} p_i I(p_i) = \sum_{i=1}^{N} p_i \log \frac{1}{p_i} = -\sum_{i=1}^{N} p_i \log p_i$$

Eis algumas propriedades:

- $\mathrm{Ent}(p_1, \cdots, p_N)$ é simétrica em $(p_1, \cdots, p_N)$.
- $\mathrm{Ent}(1, 0, \cdots, 0) = 0$ (onde se define $0 \log 0 = 0$) - um estado do qual se conhece a configuração, com certeza absoluta, tem informação nula.
- $\mathrm{Ent}(p_1, \cdots, p_N) \leq \mathrm{Ent}(1/N, \cdots, 1/N) = \log N$ com desigualdade estrita se $p_i \neq 1/N$ para algum i - *a quantidade de informação, i.e., a entropia é máxima no estado de máxima desordem, i.e., quando as várias configurações são igualmente prováveis.*

Para provar isto, notemos que $x \log x \geq x - 1$, $\forall x \geq 0$, com igualdade sse $x = 1$. Para $x \neq 0$, podemos pôr:

$$-\log x \leq \frac{1}{x} - 1$$

Portanto, fazendo $x = p_i/(1/N) = p_i N$, depois multiplicando ambos os membros por p_i e finalmente somando sobre i, lembrando que $\sum_i p_i = 1$, obtemos

$$\mathrm{Ent}(p) - \mathrm{Ent}(1/N, \cdots, 1/N) \leq 0$$

como se pretendia.

■.

Consideremos agora um certo observável $H : \Omega \to \mathbb{R}$, do qual se conhecem os valores $H_i = H(\omega_i)$, de cada configuração ω_i. Se p é uma medida de probabilidade em Ω, podemos calcular o valor médio de H:

$$\langle H \rangle_p = \sum_{i=1}^{N} p_i H_i$$

Suponhámos no entanto que se conhece o valor E do observável H. A hipótese essencial da Mecânica Estatística é que este valor deve ser interpretado como o valor médio de H, calculado relativamente a uma medida de probabilidade em Ω, que deve ser escolhida de acordo com o chamado **Princípio da Entropia Máxima** - *o valor de* $p = (p_1, \cdots, p_N) \in \mathbb{R}^N$ *deve ser o que maximiza o valor da entropia:*

$$\mathrm{Ent}(p) = -\sum_{i=1}^{N} p_i \log p_i$$

sujeito às restrições:

$$p_i \geq 0 \tag{1.1}$$

$$\sum_{i=1}^{N} p_i = 1 \tag{1.2}$$

$$\langle H \rangle_p = \sum_{i=1}^{N} p_i H_i = E \tag{1.3}$$

e apenas a estas.

Este é um problema de extremos condicionados que pode ser resolvido pelo método dos multiplicadores de Lagrange. Temos uma função, $\mathrm{Ent}(p_1, \cdots, p_n)$, para extremar e duas restrições (vamos supôr ainda que todos os $p_i > 0$):

$$F(p_1, \cdots, p_N) = \sum_{i=1}^{N} p_i - 1 = 0$$

$$G(p_1, \cdots, p_N) = \sum_{i=1}^{N} p_i H_i - E = 0$$

Devem pois existir multiplicadores de Lagrange $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ tais que:

$$\nabla \mathrm{Ent}(p) = \alpha \nabla F(p) + \lambda \nabla G(p) \tag{1.4}$$

Como $\nabla \mathrm{Ent}(p) = \left(\frac{\partial \mathrm{Ent}}{\partial p_i}\right) = (-1 - \log p_i)$, $\nabla F(p) = (1, 1, \cdots, 1)$ e $\nabla G(p) = (H_1, \cdots, H_N)$ (supômos $\nabla F(p)$ e $\nabla G(p)$ não colineares), vem que:

$$-1 - \log p_i = \alpha + \beta H_i$$

isto é:

$$p_i = e^{-1-\alpha} e^{-\beta H_i}$$

Impondo a restrição $\sum_{i=1}^{N} p_i = 1$, vem que:

$$1 = \sum_{i=1}^{N} p_i = \sum_{i=1}^{N} e^{-1-\alpha} e^{-\beta H_i} = e^{-1-\alpha} \sum_{i=1}^{N} e^{-\beta H_i}$$

o que implica que:

$$\boxed{p_i = \frac{e^{-\beta H_i}}{\mathcal{Z}(\beta)}} \tag{1.5}$$

onde pusemos:

$$\boxed{\mathcal{Z}(\beta) = \sum_{i=1}^{N} e^{-\beta H_i}} \tag{1.6}$$

Impondo a outra restrição $\sum_{i=1}^{N} p_i H_i = E$, vem que:

$$E = \sum_{i=1}^{N} p_i H_i = \sum_{i=1}^{N} \frac{e^{-\beta H_i}}{\mathcal{Z}(\beta)} H_i \tag{1.7}$$

O membro direito desta equação é uma função $\varphi(\beta)$, que deve ser igual a E. A equação (1.7) é pois do tipo $\varphi(\beta) = E$ que deve ser resolvida em ordem a β, para obter $\beta = \beta(E)$.

A entropia máxima correspondente à solução p_β, dada por (1.5) e (1.6), é dada por:

$$\begin{aligned} \mathrm{Ent}(p_\beta) &= -\sum_{i=1}^{N} p_i \log p_i \\ &= -\sum_{i=1}^{N} p_i \log\left(\frac{e^{-\beta H_i}}{\mathcal{Z}(\beta)}\right) \\ &= \beta E + \log \mathcal{Z}(\beta) \end{aligned} \tag{1.8}$$

Note que, derivando esta relação, em ordem a E, com p_β dado por (1.5), e com $\beta = \beta(E)$, obtido resolvendo (1.7), se obtem:

$$\frac{\partial \mathrm{Ent}(p_\beta)}{\partial E} = \beta + E\frac{\partial \beta}{\partial E} + \frac{\partial \log \mathcal{Z}(\beta)}{\partial \beta}\frac{\partial \beta}{\partial E} = \beta \tag{1.9}$$

já que, por (1.6):

$$\frac{\partial \log \mathcal{Z}(\beta)}{\partial \beta} = -E$$

Portanto, β representa a sensibilidade da entropia relativamente a uma variação da energia. A *temperatura* T define-se como o inverso de β (num sistema apropriado de unidades):

$$\beta = \frac{1}{T}$$

2 Generalização para espaços de probabilidade

Dado um espaço de medida $(\Omega, \mathcal{A}, \mu)$ com uma medida μ, não necessàriamente finita, um *estado termodinâmico* de $(\Omega, \mathcal{A}, \mu)$ é uma medida de probabilidade da forma:

$$\rho\mu \tag{2.1}$$

onde $\rho : \Omega \to \mathbb{R}_+$ é uma função integrável positiva. Em particular $\int_\Omega \rho(\omega) d\mu(\omega) = 1$. Portanto, uma vez fixa a medida inicial μ, os estados termodinâmicos estão em correspondência bijectiva com as densidades ρ, onde $\rho : \Omega \to \mathbb{R}_+$ é uma função integrável positiva tal que $\int_\Omega \rho(\omega) d\mu(\omega) = 1$.

A *entropia (relativa a μ) do estado termodinâmico* ρ, define-se por:

$$\boxed{\mathrm{Ent}(\rho) \stackrel{\text{def}}{=} -\int_\Omega \rho \log \rho \, d\mu} \tag{2.2}$$

Consideremos agora um observável $H : \Omega \to \mathbb{R}$ (isto é, uma variável aleatória em Ω), e, para cada $\beta \in \mathbb{R}$, o integral:

$$\boxed{\mathcal{Z}(\beta) \stackrel{\text{def}}{=} \int_\Omega e^{-\beta H(\omega)} \, d\mu(\omega)} \tag{2.3}$$

Suponhamos que este integral é finito, para um certo β. Então:

$$\boxed{\rho_\beta(\omega) = \frac{e^{-\beta H(\omega)}}{\mathcal{Z}(\beta)}} \tag{2.4}$$

define um estado termodinâmico do sistema, já que $\rho_\beta > 0$ e $\int_\Omega \rho_\beta d\mu = 1$. Notemos ainda que a entropia de ρ_β é finita:

$$\begin{aligned}
\mathrm{Ent}(\rho_\beta) &= -\int_\Omega \rho_\beta(\omega) \log \rho_\beta(\omega)\, d\mu(\omega) \\
&= -\int_\Omega \rho_\beta(\omega) \log\left(\frac{e^{-\beta H(\omega)}}{\mathcal{Z}(\beta)}\right) d\mu(\omega) \\
&= -\int_\Omega \rho_\beta(\omega) \left(\log e^{-\beta H(\omega)} - \log \mathcal{Z}(\beta)\right) d\mu(\omega) \\
&= \beta \int_\Omega \rho_\beta(\omega) H(\omega)\, d\mu(\omega) + \log \mathcal{Z}(\beta) \int_\Omega \rho_\beta(\omega)\, d\mu(\omega) \\
&= \beta \langle H \rangle_{\rho_\beta} + \log \mathcal{Z}(\beta) \qquad (2.5)
\end{aligned}$$

Problema da Entropia Máxima ... *Dado um valor* $E \in \mathbb{R}$*, calcular, de entre todos os estados* ρ *para os quais:*

$$\langle H \rangle_\rho = \int_\Omega \rho(\omega) H(\omega)\, d\mu(\omega) = E \qquad (\textit{constante})$$

aquele que maximiza entropia $\mathrm{Ent}(\rho)$ *(relativa a* μ*).*

Se, para o valor dado de E, fôr possível encontrar $\beta = \beta(E) \in \mathbb{R}$ tal que:

$$\langle H \rangle_{\rho_\beta} = \int_\Omega \rho_\beta H\, d\mu = E$$

então ρ_β é a única solução do Problema da Entropia Máxima. Mais concretamente:

▷ **Proposição 2.1 (Princípio de Entropia Máxima)** ... *Seja* $\beta \in \mathbb{R}$ *um valor para o qual* $\mathcal{Z}(\beta) < +\infty$ *e:*

$$\langle H \rangle_{\rho_\beta} = \int_\Omega \rho_\beta H\, d\mu = E$$

onde:

$$\rho_\beta = \frac{e^{-\beta H}}{\mathcal{Z}(\beta)} \qquad e \qquad \mathcal{Z}(\beta) = \int_\Omega e^{-\beta H(\omega)}\, d\mu(\omega)$$

e suponhámos que ρ *é um outro qualquer estado para o qual:*

$$\langle H \rangle_\rho = \int_\Omega \rho H\, d\mu = E$$

Então:

$$\mathrm{Ent}(\rho) \leq \mathrm{Ent}(\rho_\beta) \qquad (2.6)$$

com desigualdade estrita se ρ *e* ρ_β *diferem num conjunto de medida* μ *positiva.*

Dem.: Usar mais uma vez $x \log x \geq x - 1$, $\forall x \geq 0$, com igualdade sse $x = 1$. Para $x \neq 0$, pôr $-\log x \leq \frac{1}{x} - 1$, $x = \rho(\omega)/\rho_\beta(\omega)$. Depois multiplicar ambos os membros por $\rho(\omega)$ e finalmente integrar sobre ω.

■.

▷ **Definição 2.1 (Estado de equilíbrio)** ... *Seja H um observável em $(\Omega, \mathcal{A}, \mu)$. Se β é tal que $\mathcal{Z}(\beta) = \int_\Omega e^{-\beta H} d\mu < \infty$, então:*

$$\boxed{\rho_\beta = \frac{e^{-\beta H}}{\mathcal{Z}(\beta)}} \tag{2.7}$$

diz-se o estado de equilíbrio do sistema (relativamente ao observável H e à medida inicial μ). *A medida $\rho_\beta \mu$ diz-se a medida de Gibbs, $\mathcal{Z}(\beta)$ a função de partição e:*

$$\boxed{\mathcal{F}(\beta) = -\frac{1}{\beta}\log \mathcal{Z}(\beta)} \tag{2.8}$$

a energia livre do sistema (relativas ao observável H e à medida inicial μ).

Exemplos...

- Em $(\Omega = [0, \infty[, \mathcal{B}, dx)$ consideremos ao Hamiltoniano $H(x) = x$, e calculemos a a medida $\mu = \rho(x)dx$ que maximiza entropia e satisfaz a restrição $\langle H \rangle_\rho \equiv E$.

  Pelo teorema anterior, a medida de Gibbs é:

  $$\rho_\beta(x) = \frac{1}{\mathcal{Z}(\beta)} e^{-\beta x}$$

  onde:

  $$\mathcal{Z}(\beta) = \int_0^\infty dx\, e^{-\beta x} = \frac{1}{\beta}$$

  e β se calcula a partir de E, de acordo com:

  $$E = \langle H \rangle_{\rho_\beta} = \int_0^\infty dx\, x \beta e^{-\beta x} = -\beta \frac{\partial}{\partial \beta} \int_0^\infty dx\, e^{-\beta x} = \frac{1}{\beta}$$

  Portanto:

  $$\rho_E(x) = \frac{1}{E} e^{-x/E}$$

- Seja $(\Omega = \mathbb{N} - \{0\}, \mathcal{B}, \mu)$, onde μ é a medida de contagem (tal que $\mu(\{k\}) = 1$, $\forall n \in \mathbb{N}$), e $H(k) = k$.

  Pelo teorema anterior, a medida de Gibbs é:

  $$\rho_\beta(k) = \frac{1}{\mathcal{Z}(\beta)} e^{-\beta k}$$

  onde $\beta > 0$ deverá ser tal que:

  $$\mathcal{Z}(\beta) = \sum_{k=1}^\infty e^{-\beta k} = \frac{e^{-\beta}}{1 - e^{-\beta}} < \infty$$

  Portanto:

  $$\rho_\beta(k) = p^{k-1}(1-p), \quad \text{onde} \quad p = e^{-\beta}$$

  Por outro lado β deve ser calculado a partir de:

  $$\begin{aligned} E &= \langle H \rangle_{\rho_\beta} = \frac{1}{\mathcal{Z}(\beta)} \sum_{k=1}^\infty k\, p^{k-1}(1-p) = \frac{1-p}{p}(1-p) \sum_{k=1}^\infty k\, p^{k-1} \\ &= \frac{1-p}{p}(1-p)\frac{1}{(1-p)^2} = \frac{1}{p} \end{aligned}$$

Portanto:

$$\rho_E(k) = p^{k-1}(1-p), \qquad p = 1/E$$

é a distribuição geométrica.

- Seja $(\Omega = \{-1,+1\}^N, \mathcal{B}, \mu)$, onde μ é a medida de contagem e $S_N(\omega) = \sum_{i=1}^N \omega_i$. A medida de Gibbs ρ_β, com a restrição $\langle S_N \rangle_\beta = C$, é, de acordo com o teorema anterior:

$$\rho_\beta(\omega) = \frac{1}{\mathcal{Z}(\beta)} e^{-\beta S_N(\omega)} = \frac{1}{\mathcal{Z}(\beta)} e^{-\beta \sum_{i=1}^N \omega_i} = \frac{1}{\mathcal{Z}(\beta)} \prod_{i=1}^N e^{-\beta\omega_i} \tag{2.9}$$

onde $\beta > 0$ deverá ser tal que:

$$\mathcal{Z}(\beta) = \sum_\omega e^{-\beta\sum_{i=1}^N \omega_i} = \sum_\omega \prod_{i=1}^N e^{-\beta\omega_i} < \infty$$

Por outro lado β deve ser calculado a partir de:

$$C = \langle S_N \rangle_{\rho_\beta} = \frac{1}{\mathcal{Z}(\beta)} \sum_\omega S_N(\omega) e^{-\beta S_N(\omega)} = \frac{1}{\mathcal{Z}(\beta)} \sum_\omega \sum_{i=1}^N \omega_i \prod_{i=1}^N e^{-\beta\omega_i}$$

Não é tarefa fácil! A solução é $\rho_\beta = \nu^N$, onde ν^N é a medida produto com $\nu(+1) = p$, $\nu(-1) = 1-p$, onde $p = C/N$, isto é:

$$\rho_C(\omega) = p^k(1-p)^{N-k} \tag{2.10}$$

onde $\omega = (\omega_i)_{i=1,\ldots,N}$, com k dos ω_i são iguais a $+1$ e os restantes iguais a -1.

■.

Podemos generalizar a proposição e a definição anteriores, considerando vários observáveis $\mathbf{H} = (H_1, \cdots, H_k)$, e fazendo $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \cdots, \beta_k)$. Se $\boldsymbol{\beta}\cdot\mathbf{H} = \sum_i \beta_k H_k$, podemos enunciar resultados análogos:

▷ **Proposição 2.2** ... *Seja $\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^k$ um vector para o qual $\mathcal{Z}(\boldsymbol{\beta}) = \int_\Omega e^{-\boldsymbol{\beta}\cdot\mathbf{H}}\, d\mu < +\infty$ e:*

$$\langle H \rangle_{\rho_\beta} = \int_\Omega \rho_\beta H \, d\mu = E$$

onde:

$$\rho_\beta = \frac{e^{-\boldsymbol{\beta}\cdot\mathbf{H}}}{\mathcal{Z}(\boldsymbol{\beta})}$$

Suponhamos que ρ é um outro qualquer estado para o qual:

$$\langle \mathbf{H} \rangle_\rho = \int_\Omega \rho \mathbf{H} \, d\mu = \mathbf{E}$$

Então:

$$\mathrm{Ent}(\rho) \leq \mathrm{Ent}(\rho_\beta) \tag{2.11}$$

com desigualdade estrita se ρ e ρ_β diferem num conjunto de medida μ positiva.

■.

▷ **Definição 2.2 (Estado de equilíbrio)** ... *Seja* $\mathbf{H}$ *um observável em* $(\Omega, \mathcal{A}, \mu)$. *Se* $\boldsymbol{\beta}$ *é tal que* $\mathcal{Z}(\boldsymbol{\beta}) = \int e^{-\boldsymbol{\beta}\cdot\mathbf{H}} d\mu < \infty$, *então:*

$$\rho_\beta = \frac{e^{-\boldsymbol{\beta}\cdot\mathbf{H}}}{\mathcal{Z}(\boldsymbol{\beta})} \tag{2.12}$$

diz-se o estado de equilíbrio do sistema (relativamente ao observável $\mathbf{H}$*).*

3 Regresso aos modelos. Exemplos

Consideremos de novo a rede usual inteira $\Lambda = \Lambda_d = \mathbf{Z}^d$ em $\mathbb{R}^d$, um espaço $\mathcal{T}$ (*target space*) e o conjunto:

$$\Omega \stackrel{\text{def}}{=} \{\boldsymbol{\phi} : \Lambda \longrightarrow \mathcal{T}\} \tag{3.1}$$

de todas as *configurações*, isto é, de todas as aplicações $\boldsymbol{\phi} : \Lambda \longrightarrow \mathcal{T}$, de um modelo estatístico na rede, com Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} : \Omega \to \mathbb{R}$$

Dada uma medida ξ em $\mathcal{T}$ (não necessàriamente normalizada), e dado um volume finito $V \subset \Lambda$, consideremos a medida produto em Ω:

$$d\mu(\boldsymbol{\phi}) \stackrel{\text{def}}{=} \prod_{\mathbf{s}\in V} d\xi(\boldsymbol{\phi}(\mathbf{s})) \tag{3.2}$$

de tal forma que:

$$\int_\Omega d\mu(\boldsymbol{\phi}) = \prod_{\mathbf{s}} \int_{\mathcal{T}} d\xi(\boldsymbol{\phi}(\mathbf{s})) \tag{3.3}$$

A função de partição $\mathcal{Z}_V(\beta)$ define-se por:

$$\boxed{\mathcal{Z}_V(\beta) \stackrel{\text{def}}{=} \int_\Omega d\mu(\boldsymbol{\phi}) e^{-\beta\mathcal{H}(\boldsymbol{\phi})} = \int_\Omega \prod_{\mathbf{s}\in V} d\xi(\boldsymbol{\phi}(\mathbf{s})) e^{-\beta\mathcal{H}(\boldsymbol{\phi})}} \tag{3.4}$$

Exemplos...

- *Modelo de Ising* ... $\mathcal{T} = \{-1, +1\}$ com a medida de contagem ξ. O Hamiltoniano, com campo externo constante B, é:

$$\mathcal{H}(\phi) = -\mathcal{J} \sum_{[\mathbf{ss}']} \phi(\mathbf{s})\phi(\mathbf{s}') - B \sum_{\mathbf{s}} \phi(\mathbf{s}) \tag{3.5}$$

Neste caso:

$$\int_\Omega d\mu(\phi) = \prod_{\mathbf{s}} \sum_{\phi(\mathbf{s})=-1}^{+1}$$

e a função de partição é:

$$\boxed{\mathcal{Z}(\beta) = \prod_{\mathbf{s}} \sum_{\phi(\mathbf{s})=-1}^{+1} \exp\left[K \sum_{[\mathbf{ss}']} \phi(\mathbf{s})\phi(\mathbf{s}') + h \sum_{\mathbf{s}} \phi(\mathbf{s})\right]} \tag{3.6}$$

onde pusemos:

$$K = \beta\mathcal{J}, \qquad \text{e} \qquad h = \beta B$$

- *Modelo de p-Potts* ... $\mathcal{T} = \{1, 2, \cdots, p\}$ com a medida de contagem ξ. O Hamiltoniano é:

$$\mathcal{H}(\phi) = -\mathcal{J} \sum_{[\mathbf{ss}']} \delta_{\phi(\mathbf{s}),\phi(\mathbf{s}')}, \qquad \text{onde } \delta \text{ é o símbolo de Kronecker} \tag{3.7}$$

Neste caso:

$$\int_\Omega d\mu(\phi) = \prod_{\mathbf{s}} \sum_{\phi(\mathbf{s})=1}^{p}$$

e a função de partição é:

$$\boxed{\mathcal{Z}(\beta) = \prod_{\mathbf{s}} \sum_{\phi(\mathbf{s})=1}^{p} \exp\left[K \sum_{[\mathbf{ss}']} \delta_{\phi(\mathbf{s})\phi(\mathbf{s}')}\right]} \tag{3.8}$$

onde pusemos mais uma vez $K = \beta\mathcal{J}$.

- *Modelo $O(n)$ de Heisenberg* ... Aqui $\mathcal{T} = S^{n-1} \subset \mathbb{R}^n$ é a esfera unitária em $\mathbb{R}^n$ e o Hamiltoniano é definido por:

$$\boxed{\mathcal{H}(\boldsymbol{\phi}) \stackrel{\text{def}}{=} -J \sum_{[\mathbf{ss}']} \boldsymbol{\phi}(\mathbf{s}) \cdot \boldsymbol{\phi}(\mathbf{s}') - \sum_{\mathbf{s}} \mathbf{B}(\mathbf{s}) \cdot \boldsymbol{\phi}(\mathbf{s})} \tag{3.9}$$

onde a soma se faz sobre todos os pares de pontos vizinhos $\mathbf{r}, \mathbf{s} \in \Lambda$. É invariante por translacções e admite simetria contínua $G = O(n)$. A medida ξ em $\mathcal{T}$ é a medida usual na esfera. Assim, por exemplo:

- para $n = 2$, $d\xi = d\theta$
- para $n = 3$, $d\xi = \sin\theta d\varphi d\theta$

A função de partição é:

$$\boxed{\mathcal{Z}(\beta) = \prod_{\mathbf{s}} \int_{S^{n-1}} d\xi(\boldsymbol{\phi}(\mathbf{s})) \exp\left[K \sum_{[\mathbf{ss}']} \boldsymbol{\phi}(\mathbf{s}) \cdot \boldsymbol{\phi}(\mathbf{s}') - \sum_{\mathbf{s}} \mathbf{B}(\mathbf{s}) \cdot \boldsymbol{\phi}(\mathbf{s})\right]} \tag{3.10}$$

Assim, por exemplo, para $n = 2$ temos o chamado *modelo XY*. Pondo:

$$\phi(\mathbf{s}) = \cos\theta(\mathbf{s})\mathbf{e}_1 + \sin\theta(\mathbf{s})\mathbf{e}_2$$

temos que $\phi(\mathbf{s}) \cdot \phi(\mathbf{s}') = \cos[\theta(\mathbf{s}) - \theta(\mathbf{s}')]$ e supondo que $\mathbf{B}(\mathbf{s}) \equiv \mathbf{e}_1$, por exemplo, temos que a função de partição é:

$$\boxed{\mathcal{Z}(\beta) = \prod_{\mathbf{s}} \int_0^{2\pi} d\theta(\phi(\mathbf{s})) \exp\left[K \sum_{[\mathbf{ss}']} \cos[\theta(\mathbf{s}) - \theta(\mathbf{s}')] + \sum_{\mathbf{s}} \cos\theta(\mathbf{s})\right]} \tag{3.11}$$

- *Modelo Gaussiano* ... Aqui $\mathcal{T} = \mathbb{R}$ com a medida de Gauss ξ, de média 0 e variância 1:

$$d\xi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}x^2} dx \tag{3.12}$$

O Hamiltoniano é definido por:

$$\mathcal{H}(\boldsymbol{\phi}) \stackrel{\text{def}}{=} -J \sum_{[\mathbf{ss}']} \phi(\mathbf{s})\phi(\mathbf{s}') - B \sum_{\mathbf{s}} \phi(\mathbf{s}), \qquad \text{onde } \phi : \Lambda \to \mathbb{R} \tag{3.13}$$

e a função de partição por:

$$\mathcal{Z}(\beta) = \prod_{\mathbf{s}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\phi(\mathbf{s}) e^{-\frac{1}{2}\phi(\mathbf{s})^2} \exp\left[K \sum_{[\mathbf{s}\mathbf{s}']} \phi(\mathbf{s})\phi(\mathbf{s}') + h \sum_{\mathbf{s}} \phi(\mathbf{s})\right]$$

ou ainda:

$$\boxed{\mathcal{Z}(\beta) = \prod_{\mathbf{s}} \tfrac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\phi(\mathbf{s}) \exp\left[K \sum_{\mathbf{s}} \sum_{\mu=1}^{d} \phi(\mathbf{s})\phi(\mathbf{s}+\mathbf{e}_\mu) + h \sum_{\mathbf{s}} \phi(\mathbf{s}) - \tfrac{1}{2} \sum_{\mathbf{s}} \phi(\mathbf{s})^2\right]} \tag{3.14}$$

onde pusemos, como habitualmente $K = \beta\mathcal{J}$ e $h = \beta B$ e decidimos escrever explicitamente a soma sobre spins vizinhos.