

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.

Modelos de Mecânica Estatística

João Nuno Tavares¹

1 Modelos. Exemplos

Consideremos a rede usual inteira $\Lambda = \Lambda_d = \mathbf{Z}^d$ em \mathbb{R}^d . A forma da rede não tem especial significado no que se segue. Pontos em Λ serão representados por $\mathbf{s} = (s^1, s^2, \dots, s^d) \in \mathbb{R}^d$, onde $s^i \in \mathbf{Z}$, $\forall i$. Consideremos além disso um espaço \mathcal{T} (*target space*) que, nos modelos que analisaremos, será de um dos tipos seguintes:

- um conjunto finito, por exemplo, $\mathcal{T} = \{-1, +1\}$ no modelo de Ising, $\mathcal{T} = \{0, +1\}$ no modelo de gaz na rede, $\mathcal{T} = \{1, \dots, p\}$ no modelo de Potts.
- um espaço homogéneo de algum grupo de Lie compacto, por exemplo, $\mathcal{T} = S^n = O(n+1)/O(n)$.
- $\mathcal{T} = \mathbb{R}^n$ para algum $n \geq 1$, nos modelos vectoriais.

Consideremos agora o conjunto:

$$\Omega \stackrel{\text{def}}{=} \{\phi : \Lambda \longrightarrow \mathcal{T}\} \quad (1.1)$$

de todas as *configurações*, isto é, de todas as aplicações $\phi : \Lambda \longrightarrow \mathcal{T}$. Para um subconjunto $V \subset \Lambda$, representámos por $\phi_V : V \rightarrow \mathcal{T}$, a restrição de ϕ a V , e por Ω_V o conjunto de todas as configurações definidas em V .

Um *potencial de interação* \mathcal{J} associa, a cada subconjunto $V \subset \Lambda$, uma aplicação \mathcal{J}_V definida por:

$$\begin{array}{ccc} \mathcal{J}_V : \Omega_V & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ \phi & \longmapsto & \mathcal{J}_V(\phi) \end{array} \quad (1.2)$$

¹Centro 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>.

Se existir um $R > 0$ tal que $\mathcal{J}_V = 0$ sempre que $\text{diam}(V) > R$, a interacção diz-se de *alcance finito*, e o infimo desses R 's diz-se o *raio de interacção*.

O exemplo mais frequente é o da *interacção aos pares*, isto é, $\mathcal{J}_V = 0$, se $|V| > 2$ (onde $|V| =$ cardinal de V), definido por:

$$\mathcal{J}_{\{\mathbf{r}, \mathbf{s}\}}(\phi) \stackrel{\text{def}}{=} J_{\mathbf{rs}} \phi(\mathbf{r}) \cdot \phi(\mathbf{s}) \quad (1.3)$$

onde $J_{\mathbf{rs}}$ é um conjunto de números reais indexados pelos pares de sítios de Λ . Quando:

$$J_{\mathbf{rs}} \neq 0 \quad \text{se e só se} \quad \|\mathbf{r} - \mathbf{s}\| = 1 \quad (1.4)$$

a interacção diz-se entre pares de *sítios vizinhos*. Estamos aqui a supôr que $\mathcal{T} \subseteq \mathbb{R}^n$, e que \cdot representa o produto interno usual em \mathbb{R}^n . É também frequente considerar um *campo externo (magnético)* $\mathbf{B} : \Lambda \rightarrow \mathcal{T}$ e definir:

$$\mathcal{J}_{\{\mathbf{s}\}}(\phi) \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{B}(\mathbf{s}) \cdot \phi(\mathbf{s}) \quad (1.5)$$

Outro exemplo frequente é o de um *campo livre de massa m* , definido pelo potencial de interacção \mathcal{J} seguinte:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{\{\mathbf{s}\}}(\phi) &= \frac{1}{2} m^2 \phi(\mathbf{s})^2 \\ \mathcal{J}_{\{\mathbf{r}, \mathbf{s}\}}(\phi) &= \frac{1}{2} [\phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{s})]^2 \end{aligned} \quad (1.6)$$

Para cada sítio $\mathbf{s} \in \Lambda$, a soma:

$$\mathcal{U}_{\mathbf{s}}(\phi) = \sum_{V \in \mathcal{V}} \frac{1}{|V|} \mathcal{J}_V(\phi) \quad (1.7)$$

feita sobre todos os subconjuntos finitos $V \subset \Lambda$ que contêm \mathbf{s} , diz a *energia de interacção* da variável $\phi(\mathbf{s})$ com as variáveis $\phi(\mathbf{r})$, $\mathbf{r} \in \Lambda - \{\mathbf{s}\}$.

Finalmente, à soma formal:

$$\boxed{\mathcal{H}(\phi) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{\mathbf{s} \in \Lambda} \mathcal{U}_{\mathbf{s}}(\phi)} \quad (1.8)$$

chamámos o *Hamiltoniano* do sistema. $\mathcal{H}(\phi)$ representa a *energia total* do sistema quando este está na configuração ϕ .

Seja $\{\tau_{\mathbf{r}} : \mathbf{r} \in \mathbf{Z}^d\}$ o grupo das translacções espaciais da rede Λ , actuando no espaço de configurações Ω , através de:

$$(\tau_{\mathbf{r}}\phi)(\mathbf{s}) = \phi(\mathbf{s} - \mathbf{r}) \quad (1.9)$$

O Hamiltoniano diz-se *invariante por translacções*, ou (*especialmente*) *homogéneo*, se $\mathcal{H}(\phi) = \mathcal{H}(\tau_{\mathbf{r}}\phi)$, $\forall \mathbf{r} \in \mathbf{Z}^d$ e $\forall \phi \in \Omega$. Mais geralmente, seja $\Lambda_o \subset \Lambda$ um subgrupo, e $\{\tau_{\mathbf{r}} : \mathbf{r} \in \Lambda_o\}$ o correspondente grupo de translacções espaciais. Se o índice de Λ_o é finito, isto é, se \mathbf{Z}^d/Λ_o é finito, o Hamiltoniano diz-se Λ_o -periódico se $\mathcal{H}(\phi) = \mathcal{H}(\tau_{\mathbf{r}}\phi)$, $\forall \mathbf{r} \in \Lambda_o$.

Suponhamos agora que um grupo G actua no espaço \mathcal{T} e prolonguemos esta acção ao espaço de configurações Ω , através de:

$$(g\phi)(\mathbf{s}) = g\phi(\mathbf{s}), \quad g \in G, \quad \mathbf{s} \in \Lambda \quad (1.10)$$

O Hamiltoniano diz-se *G-invariante* se $\mathcal{H}(\phi) = \mathcal{H}(g\phi)$, $\forall g \in G$, $\forall \phi \in \Omega$.

▷ **Exemplo 1.1 (Modelo de Ising d -dimensional)** ... Aqui $\mathcal{T} = \{-1, +1\}$, o espaço de configurações é:

$$\Omega = \{\phi : \Lambda \rightarrow \{-1, +1\}\} \quad (1.11)$$

e o Hamiltoniano é definido por:

$$\mathcal{H}(\phi) \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{s} \in \Lambda} \mathcal{J}(\mathbf{r}, \mathbf{s}) \phi(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{s}) \quad (1.12)$$

onde:

$$\mathcal{J}(\mathbf{r}, \mathbf{s}) = \begin{cases} \mathcal{J} & \text{se } \mathbf{r} \text{ e } \mathbf{s} \text{ são sítios vizinhos, i.e., } \|\mathbf{r} - \mathbf{s}\| = 1 \\ 0 & \text{nos outros casos} \end{cases} \quad (1.13)$$

Quando $\mathcal{J} > 0$ o modelo diz-se *ferromagnético* e quando $\mathcal{J} < 0$ *antiferromagnético*. É claro que o modelo é invariante por translações e admite uma simetria $G = \mathbf{Z}_2$, isto é, \mathcal{H} é invariante pelo grupo com dois elementos: Id e a simetria τ definida por $(\tau\phi)(\mathbf{s}) = -\phi(\mathbf{s})$.

O modelo definido pelo Hamiltoniano:

$$\mathcal{H}(\phi) \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{s} \in \Lambda} \mathcal{J}(\mathbf{r}, \mathbf{s}) \phi(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{s}) - \sum_{\mathbf{s} \in \Lambda} B(\mathbf{s}) \phi(\mathbf{s}) \quad (1.14)$$

diz-se o *modelo de Ising com campo externo* $B : \Lambda \rightarrow \mathbb{R}$. Neste caso, o modelo é invariante apenas por translações. Usualmente $B \equiv$ constante.

▷ **Exemplo 1.2 (Modelo XY)** ... Suponhamos que $d = 2$ e que $\mathcal{T} = S^1$ (o círculo unitário em $\mathbb{R}^2 = \mathbb{C}$). É útil imaginar uma configuração como uma família de vectores unitários apoiados em cada ponto \mathbf{s} da rede e ver $\phi(\mathbf{s})$ como o ângulo orientado que o vector em \mathbf{s} faz com a parte positiva do eixo dos xx :

O Hamiltoniano do modelo XY é definido por:

$$\mathcal{H}(\phi) \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{1}{2} \sum_{[\mathbf{r}\mathbf{s}]} \cos[\phi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{s})] \quad (1.15)$$

onde a soma se faz sobre todos os pares de sítios vizinhos $\mathbf{r}, \mathbf{s} \in \Lambda$. É invariante por translações e admite simetria contínua $G = U(1) = S^1$.

▷ **Exemplo 1.3 (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:

$$\mathcal{H}(\phi) \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{1}{2} J \sum_{[\mathbf{r}\mathbf{s}]} \phi(\mathbf{r}) \cdot \phi(\mathbf{s}) \quad (1.16)$$

onde a soma se faz sobre todos os pares de pontos vizinhos $\mathbf{r}, \mathbf{s} \in \Lambda$. É invariante por translações e admite simetria contínua $G = O(n)$.

▷ **Exemplo 1.4 (Campo escalar livre de massa m)** ... Aqui $\mathcal{T} = \mathbb{R}$ e o Hamiltoniano é definido por:

$$\mathcal{H}(\phi) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{s} \in \Lambda} \sum_{\mu=1}^d [\phi(\mathbf{s} + \mathbf{e}_\mu) - \phi(\mathbf{s})]^2 + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{s} \in \Lambda} m^2 \phi(\mathbf{s})^2 \quad (1.17)$$

▷ **Exemplo 1.5 (Modelos de Biggs de interacção em grafos [2])** ... Seja \mathcal{G} um grafo (simples) finito, $\mathcal{V} = \mathcal{V}(\mathcal{G})$ e $\mathcal{E} = \mathcal{E}(\mathcal{G})$ o conjunto dos seus vértices e arestas, respectivamente, e \mathcal{A} um anel (cujos elementos representam algum tipo de atributos, côres, etc...).

O espaço das configurações é o conjunto de todas as funções $\omega : \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{A}$:

$$\Omega = \Omega(\mathcal{G}; \mathcal{A}) \stackrel{\text{def}}{=} \{\omega : \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{A}\} \quad (1.18)$$

Portanto cada configuração associa uma côr $\omega(v) \in \mathcal{A}$ a cada vértice $v \in \mathcal{V}(\mathcal{G})$. Ω é um anel para as operações usuais de soma e produto de funções.

O objectivo é agora atribuir a cada configuração ω um *peso estatístico* que reflita a estrutura local do grafo. Isto é feito da seguinte forma, de acordo com [2].

Consideremos o anel de todas as funções $\phi : \mathcal{E} \rightarrow \mathcal{A}$:

$$\Phi = \Phi(\mathcal{G}; \mathcal{A}) \stackrel{\text{def}}{=} \{\phi : \mathcal{E} \rightarrow \mathcal{A}\} \quad (1.19)$$

Cada função $\phi : \mathcal{E} \rightarrow \mathcal{A}$ dir-se-á um *fluxo* em \mathcal{G} , no sentido em que associa a cada aresta $e \in \mathcal{E}(\mathcal{G})$ um “fluxo” $\phi(e)$ (um elemento do anel \mathcal{A} também!). Definámos de seguida um *operador de cobordo* $\delta : \Omega \rightarrow \Phi$, através de:

$$(\delta\omega)(e) = \omega(v) - \omega(v') \quad \text{se } e = (v, v') \quad (1.20)$$

e consideremos ainda uma função $I : \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{R}$, tal que $I(a) = I(-a)$, $\forall a$. Quando a configuração do grafo é ω , $(\delta\omega)(e)$ representa a diferença dos valores de ω nas extremidades da aresta e e $I[(\delta\omega)(e)]$ representará a intensidade da interacção entre os dois vértices (v, v') unidos pela aresta e , quando a diferença dos seus atributos é $(\delta\omega)(e) = \omega(v) - \omega(v') \in \mathcal{A}^2$.

Definimos agora a *energia* $\mathcal{H}(\omega)$, de cada configuração ω , através:

$$\boxed{\mathcal{H}(\omega) = \sum_{e \in \mathcal{E}} I[(\delta\omega)(e)]} \quad (1.21)$$

e, finalmente, a *função de partição* do grafo, como habitualmente, através de:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_{\mathcal{G}}(\beta) &= \sum_{\omega \in \Omega} e^{-\beta \mathcal{H}(\omega)} \\ &= \sum_{\omega \in \Omega} e^{-\beta \sum_{e \in \mathcal{E}} I[(\delta\omega)(e)]} \\ &= \sum_{\omega \in \Omega} \prod_{e \in \mathcal{E}} e^{-\beta I[(\delta\omega)(e)]} \end{aligned} \quad (1.22)$$

Para relações interessantes entre Física Estatística e Teoria de Grafos ver [3].

▷ **Exemplo 1.6 (Modelo de Ising num grafo [3])** ... Consideremos de novo um grafo \mathcal{G} (simples) finito, e sejam $\mathcal{V} = \mathcal{V}(\mathcal{G})$ e $\mathcal{E} = \mathcal{E}(\mathcal{G})$ o conjunto dos seus vértices e arestas, respectivamente. Seja $\mathcal{T} = \{-1, +1\}$ e:

$$\Omega = \Omega(\mathcal{G}) \stackrel{\text{def}}{=} \{\phi : \mathcal{V} \rightarrow \{-1, +1\}\} \quad (1.23)$$

o conjunto das configurações. A cada aresta $e = (v, w)$ associámos a interacção \mathcal{I}_{vw} , entre os spins ϕ_v e ϕ_w , definida por:

$$\mathcal{I}_{vw} = -\mathcal{J}_{vw}[\phi(v)\phi(w) - 1] \quad (1.24)$$

²como $I(a) = I(-a)$ é indiferente a orientação do grafo.

de tal forma que:

$$\mathcal{I}_{vw} = \begin{cases} 0 & \text{se } \phi(v) = \phi(w) \\ 2\mathcal{J}_{vw} > 0 & \text{se } \phi(v) = -\phi(w) \end{cases}$$

A energia de uma configuração de spins ϕ , será:

$$\mathcal{H}_{\mathcal{G}}(\phi) = - \sum_{e=(v,w) \in \mathcal{E}(\mathcal{G})} \mathcal{J}_{vw} [\phi(v)\phi(w) - 1] \quad (1.25)$$

No conjunto Ω das configurações, que tem $2^{|\mathcal{V}|}$ elementos, e para cada $\beta = 1/T > 0$ (T chama-se a *temperatura*), consideremos a *medida de probabilidade de Gibbs*, p_{β} , definida por:

$$p_{\beta}(\phi) = \frac{e^{-\beta\mathcal{H}(\phi)}}{\mathcal{Z}(\beta)} \quad (1.26)$$

onde $\mathcal{Z}_{\mathcal{G}}(\beta)$ é a *função de partição*:

$$\mathcal{Z}_{\mathcal{G}}(\beta) = \sum_{\phi \in \Omega} e^{-\beta\mathcal{H}(\phi)} \quad (1.27)$$

Quando a temperatura é zero, $T = 0$ (ou $\beta = +\infty$), apenas podem ocorrer as *configurações de vácuo* ϕ_0^{\pm} , nas quais todos os spins estão igualmente alinhados, isto é, ou $\phi(v) = +1, \forall v \in \mathcal{V}$, ou $\phi(v) = -1, \forall v \in \mathcal{V}$. O sistema diz-se totalmente *magnetizado*. De facto, $\mathcal{H}(\phi_0^{\pm}) = 0$, $p_{\beta}(\phi_0^{\pm}) = 1/\mathcal{Z}(\beta)$, e para $\beta \rightarrow \infty$ a contribuição de $\mathcal{Z}(\beta)$ está toda concentrada no mínimo de \mathcal{H} , isto em $\phi_0^{\pm} \dots$

Para descrever o que acontece quando a temperatura sobe, convem definir:

- a *energia livre*:

$$\mathcal{F}_{\mathcal{G}}(\beta) \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{1}{\beta} \log \mathcal{Z}(\beta) \quad (1.28)$$

- a *energia média*:

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{H} \rangle_{\mathcal{G}}(\beta) &= \sum_{\phi \in \Omega} \mathcal{H}(\phi) p_{\beta}(\phi) \\ &= \sum_{\phi \in \Omega} \mathcal{H}(\phi) \frac{e^{-\beta\mathcal{H}(\phi)}}{\mathcal{Z}(\beta)} \\ &= \frac{\partial}{\partial \beta} \mathcal{F}_{\mathcal{G}}(\beta) \end{aligned} \quad (1.29)$$

- a *magnetização no vértice* $v \in \mathcal{V}(\mathcal{G})$:

$$\begin{aligned} \langle \phi_v \rangle_{\mathcal{G}}(\beta) &= \sum_{\phi \in \Omega} \phi(v) p_{\beta}(\phi) \\ &= \sum_{\phi \in \Omega} \phi(v) \frac{e^{-\beta\mathcal{H}(\phi)}}{\mathcal{Z}(\beta)} \end{aligned} \quad (1.30)$$

- a magnetização (total):

$$\begin{aligned}
M_{\mathcal{G}}(\beta) &= \sum_{v \in \mathcal{V}(\mathcal{G})} \langle \phi_v \rangle_{\mathcal{G}}(\beta) \\
&= \sum_{\phi \in \Omega} \left(\sum_{v \in \mathcal{V}(\mathcal{G})} \phi(v) \right) p_{\beta}(\phi) \\
&= \sum_{\phi \in \Omega} \left(\sum_{v \in \mathcal{V}(\mathcal{G})} \phi(v) \right) \frac{e^{-\beta \mathcal{H}(\phi)}}{\mathcal{Z}(\beta)}
\end{aligned} \tag{1.31}$$

- o calor específico:

$$C_{\mathcal{G}}(T) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial \langle \mathcal{H} \rangle_{\mathcal{G}}}{\partial T} \tag{1.32}$$

Quando a temperatura sobe, os estados de energia positiva começam a ocorrer com probabilidade cada vez mais elevada, a energia média cresce e a magnetização decresce.

De facto, é possível mostrar que a energia média é uma função crescente com a temperatura, mas a sua derivada em ordem a T , o calor específico, atinge um máximo já que, a temperaturas suficientemente altas, todas as configurações tornam-se igualmente prováveis não sendo possível absorver mais energia aumentando a temperatura. Portanto o calor específico é zero a altas e baixas temperaturas e deve pois ter um máximo algures.

Quanto maior é o sistema mais acentuado é esse máximo. Para materiais ferromagnéticos, com cerca de 10^{23} átomos, existe uma temperatura crítica T_c , na qual o calor específico parece divergir. Para calcular o calor específico de um ferromagneto cúbico, por exemplo, toma-se \mathcal{G} como uma rede cúbica da lado N , portanto com N^3 vértices, e calcula-se o limite termodinâmico:

$$c(T) = \lim_{|V| \rightarrow \infty} \frac{C(T)}{|V|} \tag{1.33}$$

Sob certas condições é possível mostrar que isto é equivalente a tomar duas derivadas da energia livre reduzida:

$$f(T) = \lim_{|V| \rightarrow \infty} \frac{\mathcal{F}(T)}{|V|} \tag{1.34}$$

▷ **Exemplo 1.7 (Percolação num grafo)** ... Este exemplo não é um modelo de interacção como os anteriores. Mais uma vez, consideremos um grafo *conexo* \mathcal{G} (simples) finito, e sejam $\mathcal{V} = \mathcal{V}(\mathcal{G})$ e $\mathcal{E} = \mathcal{E}(\mathcal{G})$ o conjunto dos seus vértices e arestas, respectivamente. Seja $\mathcal{T} = \{0, 1\}$ e:

$$\Omega = \Omega(\mathcal{G}) \stackrel{\text{def}}{=} \{\omega : \mathcal{E} \rightarrow \{0, 1\}\} \tag{1.35}$$

o conjunto das configurações. Numa configuração ω , a aresta $e \in \mathcal{E}(\mathcal{G})$ dir-se-á *fechada* se $\omega(e) = 0$ e *aberta* se $\omega(e) = 1$. Consideremos a medida de probabilidade em $\{0, 1\}$, definida por $\Pr\{1\} = p$ e $\Pr\{0\} = 1 - p$, e, em $\Omega(\mathcal{G}) = \{0, 1\}^{\mathcal{E}(\mathcal{G})}$, a medida produto π_p .

Dada uma configuração ω , seja:

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}(\omega) \subseteq \mathcal{E} &= \text{conjunto das arestas abertas, na configuração } \omega \\
\mathcal{F}(\omega) \subseteq \mathcal{E} &= \text{conjunto das arestas fechadas, na configuração } \omega
\end{aligned} \tag{1.36}$$

Portanto:

$$\pi_p(\omega) = p^{|\mathcal{A}(\omega)|} (1-p)^{|\mathcal{F}(\omega)|} \tag{1.37}$$

Consideremos ainda o grafo $\mathcal{G}(\omega) = \{\mathcal{V}(\mathcal{G}); \mathcal{A}(\omega)\}$, em que o conjunto de vértices é o mesmo de \mathcal{G} mas o conjunto das arestas é apenas constituído pelas arestas abertas na configuração ω . As componentes conexas deste grafo dizem-se os *aglomerados* (*clusters*) da configuração ω . Dado um vértice $v \in \mathcal{V}$, $C_v(\omega)$ representa o aglomerado da configuração ω que contem v .

O que acontece é que, para grafos infinitos, existe um valor crítico de p , digámos $p_c \in]0, 1[$, que distingue duas *fases* distintas - para $p < p_c$, os aglomerados são finitos, enquanto que, para $p > p_c$, o tamanho dos aglomerados torna-se ilimitado.

Designemos por $N_{\mathcal{G}} = N_{\mathcal{G}}(p)$ a variável aleatória $N : \Omega \rightarrow \mathbb{N}$:

$$N_{\mathcal{G}}(\omega) = \text{número de aglomerados, na configuração } \omega \quad (1.38)$$

e por:

$$\langle N \rangle(p) = \sum_{\omega \in \Omega} N(\omega) p^{|\mathcal{A}(\omega)|} (1-p)^{|\mathcal{F}(\omega)|} \quad (1.39)$$

o respectivo valor médio. Uma função que se torna singular em p_c , é o *número médio por vértice*:

$$k(p) = \lim_{|V| \rightarrow \infty} \frac{\langle N \rangle(p)}{|V|} \quad (1.40)$$

Para $p = 0$, os aglomerados são os vértices de \mathcal{G} , enquanto que, para $p = 1$, existe um só aglomerado que é o próprio grafo \mathcal{G} , e o que se espera é que $k(p)$ seja uma função contínua de p que decresce monòtonamente de 1 para 0, quando p varia de 0 a 1.

▷ **Exemplo 1.8 (Yang-Mills na rede)** ... Consideremos de novo a rede $\Lambda = \mathbf{Z}^d$, e seja \mathcal{E} o conjunto das suas arestas orientadas positivamente (pela orientação usual de \mathbb{R}^d). Se $e = (\mathbf{s}, \mathbf{s}')$ é uma aresta orientada positivamente, isto é, $\mathbf{s}' = \mathbf{s} + \mathbf{e}_\mu$, para algum $\mu = 1, \dots, d$, representámos por $-e$ a aresta $(\mathbf{s}', \mathbf{s})$.

O espaço \mathcal{T} é um grupo de Lie G (por exemplo, $SO(n)$) e o conjunto de configurações é agora constituído por todas as funções $\phi : \mathcal{E} \rightarrow G$, que associam um elemento $\phi(e) \in G$ a cada aresta $e \in \mathcal{E}(\mathcal{G})$, e que satisfazem $\phi(-e) = \phi(e)^{-1}$:

$$\Omega = \{\phi : \mathcal{E} \longrightarrow G : \quad \phi(-e) = \phi(e)^{-1}, \forall e \in \mathcal{E}\} \quad (1.41)$$

O *Hamiltoniano de Yang-Mills* é construído da seguinte forma - definámos *plaqueta* da rede $\Lambda = \mathbf{Z}^d$, como um circuito ordenado de vértices do tipo:

$$\mathcal{P} = (\mathbf{s}, \mathbf{s} + \mathbf{e}_\mu, \mathbf{s} + \mathbf{e}_\mu + \mathbf{e}_\nu, \mathbf{s} + \mathbf{e}_\nu, \mathbf{s}) \quad (1.42)$$

onde $\mu, \nu = 1, \dots, d$ e $\mu \neq \nu$. A cada uma dessas plaquetas associámos o elemento de G :

$$F_{\mu\nu}(\mathbf{s}) = \phi(\mathbf{s}, \mathbf{s} + \mathbf{e}_\mu) \phi(\mathbf{s} + \mathbf{e}_\mu, \mathbf{s} + \mathbf{e}_\mu + \mathbf{e}_\nu) \phi(\mathbf{s} + \mathbf{e}_\mu + \mathbf{e}_\nu, \mathbf{s} + \mathbf{e}_\nu) \phi(\mathbf{s} + \mathbf{e}_\nu, \mathbf{s}) \quad (1.43)$$

e finalmente tomámos o traço (ou outro caractere de G) e somámos sobre todas as plaquetas:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}(\phi) &\stackrel{\text{def}}{=} - \sum_{\mathcal{P}} \text{tr} F_{\mu\nu}(\mathbf{s}) \\ &= - \sum_{\mathbf{s} \in \Lambda} \text{tr} (F_{\mu\nu}(\mathbf{s}) F^{\mu\nu}(\mathbf{s})) \end{aligned} \quad (1.44)$$

Este Hamiltoniano possui um grande grupo de simetrias. De facto, seja $g : \Lambda \rightarrow G$ uma função arbitrária (*transformação de gauge*). Para $e = (\mathbf{s}, \mathbf{s}') \in \mathcal{E}$, definámos:

$$(g\phi)(e) = g(\mathbf{s})^{-1}\phi(e)g(\mathbf{s}'), \quad e = (\mathbf{s}, \mathbf{s}'), \phi \in \Omega \quad (1.45)$$

Então cada somando na definição de \mathcal{H} , e portanto \mathcal{H} , é invariante sob a acção de g . Portanto \mathcal{H} é invariante relativamente ao *grupo de simetrias de gauge*:

$$\mathbf{G} = \prod_{\mathbf{s} \in \Lambda} G(\mathbf{s}) \quad (1.46)$$

Geomètricamente uma configuração de Yang-Mills pode ser interpretada da seguinte forma (supondo que $G = SO(n)$, por exemplo) - a cada sítio \mathbf{s} da rede, associámos uma cópia $\mathbb{R}_{\mathbf{s}}^n$, de \mathbb{R}^n . Então cada $\phi(e)$, para $e = (\mathbf{s}, \mathbf{s}')$, é interpretada como uma isometria:

$$\phi(e) : \mathbb{R}_{\mathbf{s}}^n \longrightarrow \mathbb{R}_{\mathbf{s}'}^n \quad (1.47)$$

e a configuração completa $\phi = \{\phi(e)\}$ como uma *conexão* entre todos esses espaços $\mathbb{R}_{\mathbf{s}}^n$. O Hamiltoniano fica invariante se qualquer dos $\mathbb{R}_{\mathbf{s}}^n$ é transformado por uma isometria $g(\mathbf{s}) \in SO(n)$.

References

- [1] Le Bellac M., "*Quantum and Statistical Field Theory.*" Oxford U.P., Inc., 1998.
- [2] Biggs N.L., "*Interaction Models.*", Cambridge U.P., 1977.
- [3] Essam J.W., "Graph Theory and Statistical Physics.", *Discrete Mathematics*, vol. 1, no.1 (1971) 83-112.
- [4] Sinai Ya.G., "*Theory of Phase Transitions: Rigorous Results.*", Pergamon Press, 1982.