Universidade de São Paulo
Instituto de Física

Regularização e Convergência da Série de Mayer de um Gás de Yukawa na Região de Colapso

Wilhelm Kroschinsky

Orientador: Prof. Dr. Domingos H. U. Marchetti

Dissertação de mestrado apresentada ao Instituto de Física como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Ciências.

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Domingos H. U. Marchetti - Orientador (IF-USP)
Prof. Dr. Rodrigo Bissacot Proença (IME-USP)
Profa. Dra. Maria Eulália Vares (UFRJ)

São Paulo
2017

FICHA CATALOGRÁFICA
Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Kroschinsky, Wilhelm

Regularização e convergência da série de Mayer de um gás de Yukawa na região de colapso. São Paulo, 2017.

Dissertação (Mestrado) – Universidade de São Paulo. Instituto de Física. Depto. de Física Geral

Orientador(a): Prof. Dr. Domingos Humberto Urbano Marchetti
Área de Concentração: Física Matemática.

Unitermos: 1. Mecânica estatística; 2. Convergência; 3. Séries.

USP/IF/SBI-086/2017

University of São Paulo
Physics Institute

Regularization and Convergence of the Mayer Series of the Yukawa Gas in the Region of Collapse

Wilhelm Kroschinsky

Supervisor: Prof. Dr. Domingos H. U. Marchetti

Dissertation submitted to the Physics Institute of the
University of São Paulo in partial fulfillment of the
requirements for the degree of Master of Science.

Examining Committee:

Prof. Dr. Domingos H. U. Marchetti - Supervisor (IF-USP)

Prof. Dr. Rodrigo Bissacot Proença (IME-USP)

Profa. Dra. Maria Eulália Vares (UFRJ)

São Paulo
2017

Resumo

Estudamos a série de Mayer de um gás de Yukawa em duas dimensões. Introduzimos brevemente a noção de série de Mayer de um gás não-ideal através do uso de expansões em clusters e apresentamos motivações pelas quais o seu uso pode apresentar dificuldades. Introduzimos um formalismo algébrico (c.f. [36]) que servirá de ferramenta alternativa para o estudo da convergência dessa série através do método dos majorantes via equações diferenciais parciais (c.f. [7],[9]). Uma vez que o gás de Yukawa não é regular na origem, é preciso regularizá-lo para utilizar o método dos majorantes. Acredita-se (c.f. [3]) que esta série (não regularizada) apresenta divergência do coeficiente de ordem $2k$ no regime de temperatura (recíproca) $\beta > \beta_k \doteq 8\pi(2k - 1)/2k$ por conta do colapso dos multipolos neutros contido nos clusters dessa ordem, e que neste regime, a retirada desses termos é suficiente para garantir a convergência da série remanescente. Por fim, estudamos a convergência da série de Mayer para um gás de Yukawa bidimensional quando a regularização é removida no intervalo $\beta < 16\pi/3$ conforme obtido em [8] e apresentamos uma extensão desse resultado para o regime $\beta < 6\pi$. Mostramos que haverá de fato divergência do coeficiente de ordem 2 da série, que pode ser regularizado enquanto $\beta < 6\pi$, garantindo a convergência da série com termo 2 omitido.

Palavras-Chave: Gás de Yukawa, convergência, colapso, método dos majorantes, thresholds, regularização.

Abstract

We study the Mayer series for the bidimensional Yukawa gas. We briefly introduce the notion of a Mayer series of a non-ideal gas using cluster expansions and present some motivations on the difficulties this formalism may present. An algebraic formalism is introduced in order to develop an alternative tool to study this series using a majorant method via partial differential equations. As the Yukawa gas is not regular at the origin, it should be regularized for the majorant method to be applicable. It is believed that the non-regularized Yukawa series presents divergence on its coefficients of order $2k$ when the inverse temperature $\beta > \beta_k \doteq 8\pi(2k - 1)/2k$ due to the collapse of neutral multipoles belonging to clusters of this order and if we omit these coefficients, the convergence is obtained. Finally we study the convergence of the Mayer series of a bidimensional Yukawa gas when the regularization is removed when $\beta < 16\pi/3$ as

obtained in [8] and we extend these results to $\beta < 6\pi$. It is shown explicitly that the coefficient of order 2 diverges but can be regularized if $\beta < 6\pi$, assuring the convergence of the remaining series when the coefficient of order 2 is omitted.

Keywords: Yukawa Gas, convergence, collapse, majorant method, thresholds, regularization

Agradecimentos

À minha família, em especial meus pais Valéria e Paulo e meu irmão Matthaeus pelo apoio, compreensão e carinho.

Ao meu orientador, prof. Domingos Marchetti, por me guiar neste universo tão vasto que é a pesquisa científica. Sem ele, este trabalho não teria sido possível.

Aos meus amigos que sempre estiveram dispostos à contribuir e discutir física e matemática. Com eles aprendi e aprendo muito todos os dias. Em especial, Cedrick Miranda que incansavelmente esteve disposto à me ajudar durante esses anos, com sábios conselhos e Theo Motta, pela amizade e pelas discussões que datam desde a graduação. Deixo registrado também minha gratidão ao meu atual grupo de pesquisa: Rafael Haury e Rene Freire pelo convívio e aprendizado.

Aos meus tantos amigos que, não necessariamente ligados às discussões técnicas, estão sempre presentes e merecem citação neste trabalho, em especial Valter Regensteiner e Laís Leonel, Adalberto Araújo e Lucas Dan.

À CAPES pelo apoio financeiro.

“One doesn’t discover new lands without consenting to lose sight of the shore for a very long time. ”

Andre Gide

Sumário

Lista de Figuras	11
Lista de Tabelas	13
Introdução	14
1 Introdução aos Grafos e às Séries de Mayer	19
1.1 Aspectos Gerais da Teoria de Grafos	19
1.2 Mecânica Estatística - Primeiras Definições	24
1.3 Expansões em Clusters e a Série de Mayer	29
2 Equação do Calor e Derivação da Equação Majorante	37
2.1 A representação de Sine Gordon	37
2.2 O Formalismo Algébrico	41
2.3 Decomposição em escalas	45
2.3.1 Regularização do Gás de Yukawa	47
2.4 A equação do Calor	49
2.5 Equação Diferencial do Majorante	56
2.5.1 Equação Majorante e Potenciais Não-Negativos	65
3 Equação Majorante e o Gás de Yukawa	69
3.1 A conjectura de Gallavotti, Benfatto e Nicoló	69
3.2 Primeiros Resultados - A série de Mayer para $\beta < 4\pi$	71

3.3	Divergência de $a_2(t)$	76
3.4	A série de Mayer para $4\pi < \beta < 16\pi/3$	79
3.5	Regularização dos coeficientes $a_2(t)$ para $\beta \in (4\pi, 6\pi)$	82
3.6	Primeiras Discussões	91
3.7	O bound de energia para um sistema de três partículas	95
3.7.1	Energia Mínima de um sistema de três partículas	96
3.8	Convergência da Série de Mayer para $16\pi/3 < \beta < 6\pi$	100
4	Discussões Finais e Conclusões	103
	Apêndice	105
A	Medidas Gaussianas	107
B	Comentários sobre o formalismo Algébrico	109
C	Notações e Funções Especiais	113
D	Introdução à Teoria de Distribuições e Derivadas Funcionais	117
E	Função W de Lambert	123
	Referências Bibliográficas	127

Lista de Figuras

1.1	Representação de um grafo G	20
1.2	Grafo planar	22
1.3	Grafos de ordem 3	30
3.1	Função $x^2K_0(x) + xK_1(x)$ como função de $x > 0$	95
3.2	Sistema de três cargas no plano. Cores distintas representam cargas distintas.	97
C.1	Funções de Bessel de segunda espécie de ordens 0, 1 e 2	114
C.2	Função $h(x)$	116
E.1	Gráfico de $T(x) = xe^x$	123
E.2	Gráficos das funções W (linha cheia) e W_{-1} (linha pontilhada)	124

Lista de Tabelas

1.1	Partições e Grafos conexos em partições de $\{1, \dots, n\}$	31
-----	--	----

Introdução

Desde os anos 1930 a chamada *série de Mayer* é objeto de estudo em mecânica estatística rigorosa. Essa é uma série para a pressão de um gás que consiste na expansão em potências da atividade $z = e^{\beta\mu}$ do logaritmo da função de partição $\Xi_V(\beta, z)$ de um sistema de partículas confinado em um recipiente de volume V no ensemble grande canônico. Aqui, β representa o inverso da temperatura absoluta e μ o potencial químico do sistema.

A série de Mayer tem grande importância, tanto em sistemas na rede quanto em sistemas contínuos, porque é uma ferramenta que nos permite obter a equação de estado de um determinado gás, mesmo quando as interações entre seus constituintes são complexas o suficiente para tornar a obtenção da função de partição $\Xi_V(\beta, z)$ improvável, devido à dificuldade de se resolver analiticamente as integrais à ela relacionadas. Além disso, a não analiticidade da série de Mayer pode indicar fenômenos de transição de fase, assunto bastante explorado em mecânica estatística rigorosa, física do estado sólido e áreas afins.

Por série de Mayer de um gás de Yukawa entendemos a série de Mayer de um sistema de partículas carregadas com cargas ± 1 que interagem via potencial de Yukawa¹ Nosso trabalho se restringe ao estudo desses objetos em duas dimensões. A série de Mayer de um gás de Yukawa começou a ser estudada mais sistematicamente no final da década de 1970 e início da década de 1980, de onde podemos citar algumas grandes referências como [3], [15], [2], [14] entre outros. De início, as séries de Mayer (não necessariamente para o gás de Yukawa) eram estudadas utilizando-se expansões em grafos, grafos conexos, árvores e afins. Nessa direção, alguns resultados foram obtidos à respeito da convergência dessas séries para classes bastante amplas de potenciais, como potenciais estáveis e não-negativos, conforme pode ser visto nos trabalhos [29], [35] e [21]. Entretanto, as interações via Yukawa não são regulares na origem, e portanto é necessário mais

¹Para uma discussão detalhada à respeito dos potenciais de Yukawa, ver [12].

do que esses resultados para se provar a convergência da série, neste caso. Precisamos então regularizar o potencial de Yukawa através do uso de *escalas*. Além disso, combinatória envolvida no estudo de grafos sempre gerou grandes obstáculos para o progresso dos resultados à respeito dessas séries.

Alguns anos mais tarde, uma sequência de trabalhos de D. Brydges e T. Kennedy (c.f. [8], [9] e [7]) propõe novas ideias de estudo para as séries de Mayer utilizando equações diferenciais parciais. Essas técnicas consistiam, basicamente, em introduzir técnicas de grupo de renormalização e com esse formalismo desenvolver equações diferenciais para um *majorante* da pressão; o raio de convergência do suposto majorante também seria raio de convergência da série da pressão. Essas novas ferramentas tornam-se bastante importantes no estudo das séries de Mayer, em primeiro lugar pela simplicidade que elas carregam e em segundo lugar por podermos utilizar infinitas escalas ao mesmo tempo, algo que o formalismo via grafos não possibilitava antes.

Segundo [3], o estudo da série de Mayer para um gás de Yukawa bidimensional apresenta uma dificuldade: dado $n \in \mathbb{N}$, os primeiros $n-1$ termos pares dessa série divergem no regime $\beta < \beta_{2n} \doteq 8\pi(2n-1)/2n$. Esses intervalos são chamados de *thresholds*. Embora bem argumentado e aceito, esse fato não parece estar formalmente demonstrado até o presente momento. Ele será discutido na seção 3.1.

Neste trabalho, exploramos as ideias propostas pelos trabalhos de Brydges e Kennedy citados acima, com base na releitura destes feita por L. Guidi e D. Marchetti (c.f. [23] e [22]). Nosso principal objetivo é mostrar que os resultados propostos em [9] para $\beta < 16\pi/3^2$ podem ser estendidos para $\beta < 6\pi$, ou seja, buscamos estudar as séries de Mayer de um gás de Yukawa bidimensional dentro do primeiro threshold, onde o primeiro coeficiente par de Mayer é esperado divergir. Assim como na releitura proposta pelos professores D. Marchetti e L. Guidi, um formalismo algébrico será introduzido neste trabalho, formalismo esse desenvolvido por Ruelle (c.f. [36]) que acaba por incorporar de maneira natural a combinatória existente no formalismo via grafos e nos trabalhos citados de Brydges e Kennedy.

Esta dissertação encontra-se dividida em 4 capítulos, sendo o último deles referente às conclusões do trabalho. Os três primeiros capítulos seguem a exposição da teoria em paralelo ao desenvolvimento cronológico dos assuntos aqui tratados. No primeiro capítulo, introduzimos o formalismo da mecânica estatística clássica em sistemas contínuos e apresentamos as séries de Mayer de um dado sistema termo-

²Embora $16\pi/3$ não seja extremal de nenhum threshold, esse valor aparecerá no nosso modelo, como será descrito no capítulo 3.

dinâmico tal como ele foi inicialmente estudado, em termos de expansões em grafos. Por conta disso, uma primeira seção foi incorporada ao texto com a finalidade de discutir brevemente alguns conceitos básicos de teoria de grafos que estarão presentes durante o texto.

No segundo capítulo, damos espaço à representação de Sine Gordon e ao formalismo algébrico de Ruelle mencionado acima, e traduzimos os conceitos do capítulo 1 nessa nova linguagem. Neste contexto abrimos espaço também para uma formulação funcional que difere dos trabalhos de D. Marchetti e L. Guidi. Procedemos com a regularização dos potenciais de Yukawa para convencer o leitor da necessidade de se utilizar uma decomposição em escala quando não possuímos um potencial regular na origem. Essa decomposição em escala se une naturalmente tanto à representação de Sine Gordon quanto ao formalismo algébrico, de forma que conseguimos encontrar, na seção 2.4, uma equação do calor para a sequência de funções de Ursell complexas, que nos serve como ponte para encontrar um sistema de equações diferenciais para a função (real) de Ursell $\psi_n^c(t, \vec{\xi})$. A solução desse sistema de equações diferenciais gera um problema tão complexo quanto o problema original cuja convergência da série de Mayer via grafos deveria ser obtida. Por conta disso, utilizamos esse sistema para *majorar* os coeficientes de Mayer $b_{n,\Lambda}$, obtendo assim equações para o majorante dessa série, tema discutido na seção 2.5.

Por fim, o capítulo três introduz uma discussão sobre a existência dos thresholds acima mencionados conforme [3], resultado esse que será chamado neste trabalho de conjectura³ BGN (devido aos autores do trabalho: Benfatto, Gallavotti e Nicoló). Além disso, este capítulo discute a convergência da série de Mayer para um gás de Yukawa para os regimes de temperatura $\beta < 4\pi$, $\beta < 16\pi/3$ e $\beta < 6\pi$ utilizando o método dos majorantes desenvolvido no capítulo 2. Mostramos então como obter os resultados (já conhecidos) de convergência da série $\beta < 4\pi$ e $\beta < 16\pi/3$ e, finalmente, como estender esses resultados para $\beta < 6\pi$.

³Conforme discutido no capítulo 3, o termo conjectura se deve ao fato de que a discussão presente neste trabalho tem caráter heurístico e não representa uma demonstração formal. Ao que tudo indica, não há uma demonstração formal deste resultado e, por conta disso, utilizaremos a palavra conjectura quando formos mencioná-lo

Capítulo 1

Introdução aos Grafos e às Séries de Mayer

1.1 Aspectos Gerais da Teoria de Grafos

A teoria de grafos desempenha um papel fundamental na descrição de modelos de mecânica estatística rigorosa. Como veremos adiante, equações de estado termodinâmicas podem ser obtidas através das chamadas séries de Mayer, que são séries de potências cujos coeficientes são somas sobre certos tipos de grafos. Por conta disso, é natural que reservemos um pequeno capítulo ao estudo desses objetos matemáticos. A presente discussão foi baseada nas referências [40] e [6].

A figura 1.1 representa pontos ligados por linhas; podemos associar uma tal representação à um conjunto de situações da vida real. Por exemplo, podemos imaginar que cada ponto na figura 1.1 represente uma pessoa e cada ligação entre dois pontos represente um laço de amizade entre as duas pessoas respectivas. Em suma, existem diversas situações reais que podem ser representadas por figuras análogas à figura 1.1.

A ideia de grafo é uma abstração matemática dos conceitos ilustrados pela figura 1.1. Na verdade, grafos podem (e devem) ser esquematizados de forma a indicar suas propriedades matemáticas e ajudar a tirar conclusões às vezes não tão triviais. Uma vez introduzidas essas ideias gerais, estamos prontos para definir um grafo de maneira formal.

Definição 1.1.1. (*Grafos*) Uma grafo G é uma tripla ordenada $(V(G), E(G), < \cdot >)$ que consiste em um conjunto não-vazio de vértices $V(G)$, um conjunto $E(G)$ disjunto de $V(G)$ de arestas e uma função indicente $< \cdot >$ que associa a cada par-ordenado de (não necessariamente distintos) vértices de G uma

Figura 1.1: Representação de um grafo G

aresta G .

■

Com a definição 1.1.1, podemos então escrever explicitamente os conjuntos $V(G)$, $E(G)$ e as funções incidentes $\langle \cdot \rangle$ para o grafo representado na figura 1.1:

$$\begin{aligned}
 V(G) &= \{v_1, v_2, v_3, v_4, v_5\} \\
 E(G) &= \{e_1, e_2, e_3, e_4, e_5, e_6, e_7, e_8\} \\
 \langle v_1 v_2 \rangle &= e_1, \langle v_2 v_3 \rangle = e_2, \langle v_3 v_4 \rangle = e_4 \\
 \langle v_4 v_5 \rangle &= e_6, \langle v_2 v_4 \rangle = e_5, \langle v_2 v_5 \rangle = e_7 \\
 \langle v_3 v_3 \rangle &= e_3, \langle v_2 v_5 \rangle = e_8
 \end{aligned}$$

Cabem aqui algumas observações importantes: primeiramente, dado um grafo G , existem várias formas de representa-lo através de desenhos. Entretanto, a forma com que o grafo é desenhado não deve ter significado matemático, ou seja, embora haja mais de uma forma de representa-lo, todas as formas devem ser vistas como equivalentes. Assim, o desenho de um grafo deve servir simplesmente para representar as relações indidentes entre seus vértices e suas arestas. Em segundo lugar, como visto na figura 1.1, duas arestas podem se interceptar em pontos que não são vértices, como é o caso das arestas e_1 e e_6 por exemplo. Isso acontece por conta da forma pelas quais suas linhas foram representadas. Existe, entretanto, grafos

cujas arestas se interceptam apenas em vértices e a esses grafos damos o nome de *grafos planares*, já que são representados de maneira simples em um plano.

Uma aresta entre dois vértices iguais é chamada de *laço*. Analogamente, uma aresta que conecta dois vértices distintos recebe o nome de *ligação*. Duas ligações que tem um vértice comum são chamadas de *ligações adjacentes*. Portanto, a título de exemplo, na figura 1.1 e_3 representa um laço, qualquer outra aresta e_j com $j = 1, \dots, 8$ e $j \neq 3$ representa uma ligação e e_5, e_6 são ligações adjacentes.

Definição 1.1.2. (Subgrafo) Um subgrafo H de um grafo G é um grafo cujos vértices $V(H)$ e cujas arestas $E(H)$ são ambos subconjuntos de $V(G)$ e $E(G)$, respectivamente. Portanto, um subgrafo H de um grafo G é tal que $V(H) \subseteq V(G)$ e $E(H) \subseteq E(G)$, de onde escrevemos então $H \subseteq G$. Se $H \subset G$, ou seja, $H \subseteq G$ mas $H \neq G$, dizemos que H é subgrafo próprio de G . ■

Definiremos agora a ideia de *passeio*, que será central para o estudo dos chamados *grafos conexos*.

Definição 1.1.3. (Passeio) Seja G um grafo. Um passeio em G é uma sequência não-nula $W = v_0 e_1 v_1 e_2 \dots v_k$ cujos termos são, alternadamente, vértices e arestas e tais que, $1 \leq i \leq k$, e_i conecta os vértices v_{i-1} e v_i . Dizemos que W é um passeio entre os vértices v_0 e v_k , ou que W é um (v_0, v_k) -passeio. Os vértices v_0 e v_k são chamados, respectivamente, de origem e término do passeio, enquanto que os vértices $v_1, \dots, v_{k-1}$ são chamados de vértices internos de W . O número inteiro k é chamado de comprimento de W . Se $v_0 = v_k$, W recebe o nome de passeio fechado. ■

A definição de passeio acima é bastante intuitiva quando imaginamos representações de grafos por meio de desenhos; a grosso modo, imaginamos a ideia de passeio como uma transição entre vértices através de ligações entre os mesmos. Obviamente, um passeio pode ter origem e término em um mesmo vértice, bem como passar ou não por uma mesma ligação. Portanto, torna-se conveniente classificar os tipos de passeios que podemos ter. Com isso, chegamos à seguinte definição:

Definição 1.1.4. (Trilha, Caminho, Ciclo) Seja W um passeio em um grafo G . Se todas as arestas $e_1, \dots, e_k$ de W forem distintas, W é chamado de trilha; analogamente, se todos os vértices $v_0, \dots, v_k$ de W forem distintos, W é chamado de caminho. Se apenas $v_0 = v_k$ (origem e término são iguais) mas todos os outros vértices de W forem distintos, W é chamado de ciclo.

Figura 1.2: Grafo planar

A figura 1.2 representa um grafo planar no qual podem ser destacados um passeio W , um caminho e uma trilha. De fato, para esse grafo, exemplos dos objetos definidos acima são:

$$W = uavfyfvgyhwy \quad (\text{Passeio})$$

$$W = wcxdyhwbygy \quad (\text{Trilha})$$

$$W = xcwhy euav \quad (\text{Caminho})$$

Note que, em uma trilha, pode haver vértices comuns embora as arestas sejam todas diferentes.

Definição 1.1.5. (Grafos conexos, árvores) Um grafo G é dito ser conexo se para quaisquer dois vértices v_i e v_j de $V(G)$ existe um caminho entre v_i e v_j . Um grafo conexo que não contém ciclos é chamado de árvore.

Note que, com a definição acima, um grafo formado por um único vértice é, por definição, conexo.

Podemos associar a cada vértice v_k de um grafo um número natural de forma a torna-lo um *grafo indexado*. Assim, a simples permutação de dois vértices distintos gera um grafo diferente. Portanto, dado um conjunto $\{1, \dots, n\}$ de índices, podemos formar diferentes grafos indexados por $1, \dots, n$ e com n vértices. Um grafo de n vértices receberá o nome de *grafo de ordem n* .

Teorema 1.1.1. *Seja T um grafo com n vértices. Então, são equivalentes as seguintes afirmações:*

1. T é uma árvore;
2. T não contém ciclos e tem $n-1$ arestas;
3. T é conexo e tem $n-1$ arestas;

Demonstração. Vamos considerar que $n \geq 2$ já que, se $n = 1$, todas as afirmações são triviais.

$1 \Rightarrow 2$ Suponhamos que T seja uma árvore. Assim, T não tem ciclos por definição. Dessa forma, a remoção de uma aresta qualquer de T transforma T em dois novos grafos que não contém ciclos e são conexos, sendo portanto árvores. Somando o número de arestas de cada uma das duas árvores geradas, teremos um valor uma unidade menor que o número total de seus vértices. A tese é provada notando-se que podemos repetir o processo no máximo $n - 1$ vezes.

$2 \Rightarrow 3$ Vamos assumir agora que T não contém ciclos e tem $n - 1$ arestas. Se T for desconexo, então cada componente de T é um grafo conexo que não contém ciclos e, pelo item 1, cada componente terá o número de vértices excedendo o número de arestas por uma unidade. Assim, somando-se todos os vértices e todas as arestas de T , o número de vértices excederá o número de arestas em, no mínimo, duas unidades, sendo portanto uma contradição, já que T contém $n-1$ arestas por hipótese.

$3 \Rightarrow 1$ Se T é conexo e tem $n - 1$ arestas, T não pode conter ciclos e, portanto, T é uma árvore. □

A seguir, vamos enunciar e demonstrar uma proposição que será importante para estimarmos a convergência absoluta da série de Mayer.

Proposição 1.1.1. *Seja B_n o número de grafos conexos formados por n vértices. Então vale a desigualdade:*

$$B_n \geq 2^{\frac{(n-1)(n-2)}{2}} \quad (1.1.1)$$

Demonstração. Vamos inicialmente calcular o número total de grafos (conexos ou não) A_n com n vértices. Dados os n vértices de um grafo qualquer, o número de pares de vértices diferentes é dado por

$$\frac{n!}{2!(n-2)!} = \frac{n(n-1)}{2}.$$

Dessa forma, procedemos da seguinte maneira: para cada par (i, j) do total de n vértices, associamos o número 1 se houver uma ligação entre i e j ou associamos o número 0 caso contrário. Assim, para cada par (i, j) de vértices, haverá duas opções apenas: ou (i, j) estão ligados ou não estão, ou seja, formaremos seqüências de zeros e uns com $\frac{n(n-1)}{2}$ termos. O número total de possibilidades será dado então por

$$\underbrace{2 \cdots 2}_{\frac{n(n-1)}{2}} = 2^{\frac{n(n-1)}{2}}.$$

Já que cada par assume dois valores possíveis. Portanto, o número total de grafos que se pode formar com n vértices é $A_n = 2^{\frac{n(n-1)}{2}}$.

Agora, vamos estimar o número de grafos conexos dentro dos A_n grafos totais. Para isso, pegamos a seqüências de zeros e uns construídas acima e pegamos aquelas nos quais as haja ligação entre os vértices $(1, 2), (3, 4), \dots, (n-1, n)$, ou seja, fixamos $n-1$ ligações e deixamos os outros $\frac{n(n-2)}{2} - n - 1 = \frac{(n-1)(n-2)}{2}$ pares de vértices de forma arbitrária, podendo ou não estarem ligados. Por construção, os grafos associados às seqüências escolhidas anteriormente serão conexos. Como existem (pelo mesmo raciocínio usado anteriormente) $2^{\frac{(n-1)(n-2)}{2}}$ maneiras diferentes de se conectar os $\frac{(n-1)(n-2)}{2}$ vértices livres, com $n-1$ ligações fixas, e como qualquer um desses vértices será conexo, existem ao menos $2^{\frac{(n-1)(n-2)}{2}}$ grafos conexos de n vértices, de onde concluímos a demonstração da proposição. □

1.2 Mecânica Estatística - Primeiras Definições

Trataremos neste trabalho de problemas de mecânica estatística sob um ponto de vista rigoroso e, portanto, reservamos uma primeira seção para definir as grandezas de interesse que serão estudadas no restante do texto. Em um primeiro momento, estamos interessados em descrever sistemas termodinâmicos contidos em recipientes fechados e, com essa finalidade, consideraremos um subconjunto $X \subset \mathbb{R}^d$ como objeto matemático que irá caracterizar esse recipiente. O limite termodinâmico e possíveis generalizações de resultados importantes serão abordadas no texto à medida que forem necessários. O conjunto X acima definido receberá o nome de *rede contínua* ou, simplesmente, *rede* do sistema, em analogia à nomenclatura de sistemas discretos.

Começamos definindo a noção de *configuração*, que é fundamental em toda a teoria subsequente:

Definição 1.2.1. (Configuração) Com a notação acima, seja $\Lambda = X \times S$ onde $S \subset \mathbb{R}$ é, em geral, um conjunto compacto e discreto. Chama-se configuração de uma partícula o par $\vec{\xi} = (\vec{x}, \sigma) \in \Lambda$ onde $\vec{x}$ representa a posição da partícula na rede X . Uma configuração de n partículas é um vetor $\vec{\xi} = (\xi_1, \dots, \xi_n) \in \Lambda^n$ onde cada componente $\vec{\xi}_j$ com $1 \leq j \leq n$ representa a configuração da j -ésima partícula do sistema. ■

Note que o conjunto S caracteriza o sistema do ponto de vista físico. Com efeito, S assume valores $\{-e, +e\}$ quando se descreve um sistema composto por cargas elétricas elementares, S assume valores $\{-1, 1\}$ em sistemas constituídos por corpos de spins ± 1 e assim sucessivamente.

Uma maneira mais geral de caracterizar o sistema físico se dá a partir de sua *energia potencial*. É natural a seguinte definição:

Definição 1.2.2. (Potencial e Energia Potencial) Seja $n \geq 0$ e $\vec{\xi} = (\xi_1, \dots, \xi_n) \in \Lambda^n$ uma configuração de n partículas. Denotaremos por $U_n(\vec{\xi}) = U(\xi_1, \dots, \xi_n)$ a função a valores reais chamada de energia potencial de um sistema de n partículas, onde a i -ésima partícula está localizada na posição x_i . Se $n = 0$ ou $n = 1$, definimos $U \equiv 0$. Assumiremos que $U(\xi_1, \dots, \xi_n)$ é invariante com respeito à permutação de seus índices. Além disso, podemos escrever

$$U(\xi_1, \dots, \xi_n) = \sum_{1 \leq i < j \leq n} \sigma_i \sigma_j v(|x_i - x_j|), \quad (1.2.1)$$

se as partículas do sistema interagem apenas aos pares. A função v em (1.2.1) é chamada de potencial de dois corpos, ou simplesmente potencial. Note que v como escrito acima é invariante por translação:

$$v(|(x_i + a) - (x_j + a)|) = v(|x_i - x_j|), \quad a \in \mathbb{R}^d \quad (1.2.2)$$

o que faz com que U em (1.2.1) também o seja. ■

A descrição estatística adotada em sistemas como os que trataremos neste texto é dado através do que chamamos de *ensemble grande canônico*, que é descrita através da seguinte definição.

Definição 1.2.3. (Função de Partição Grande Canônica) Seja $\Omega \doteq \bigcup_{n \geq 0} \Lambda^n$. Fixado $n \in \mathbb{N}$, definimos uma medida de probabilidade grande canônica $dP(x, \sigma)$ em Ω como sendo

$$dP(x, \sigma) \doteq \frac{1}{\Xi_\Lambda(\beta, z)} \frac{z^n}{n!} e^{-\beta U(\xi_1, \dots, \xi_n)} d^n \mu(x) d^n \nu(\sigma), \quad (1.2.3)$$

onde $d^n\mu(x) = d^n x$ é a medida de Lebesgue em $\mathbb{R}^{nd}$ e $d^n\nu(\sigma)$ é a medida de contagem em S . Além disso, definimos $dP(x, \sigma) = 1$ se $n \equiv 0$. O fator de normalização $\Xi_\Lambda(\beta, z)$ é a chamada função de partição grande canônica e é dada por

$$\Xi_\Lambda(\beta, z) \doteq \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \int_{\Lambda^n} e^{-\beta U(\xi_1, \dots, \xi_n)} d^n\mu(x) d^n\nu(\sigma). \quad (1.2.4)$$

A tripla $(\Omega, \Sigma, dP(x, \sigma))$, onde Σ é uma σ -álgebra associada a Ω , forma um espaço de medida, que chamaremos aqui de espaço de medida grande canônico. ■

Alguns comentários devem ser feitos. Primeiramente, o subíndice Λ em $\Xi_\Lambda(\beta, z)$ se refere ao fato de estarmos considerando ainda uma rede finita limitada por X . Quando existe, o limite $X \nearrow \mathbb{R}^d$ é chamado de *limite termodinâmico*. Além disso, utilizaremos daqui em diante a notação¹ $d^n\rho(\xi) = d^n\mu(x)d^n\nu(\sigma)$ por simplicidade. Finalmente, o termo $e^{-\beta U(\xi_1, \dots, \xi_n)}$ será de grande importância em todo o texto e aparecerá com frequência; de fato, sua importância é tal que costumamos associar a esse termo uma notação especial, a saber:

$$\psi_n(\vec{\xi}) \doteq e^{-\beta U(\xi_1, \dots, \xi_n)}. \quad (1.2.5)$$

Chamamos $\psi_n(\vec{\xi})$ de *função peso de Boltzmann*. Note que o subíndice n diz respeito ao número de componentes do vetor de configuração $\vec{\xi}$ associado à energia potencial $U = U(\vec{\xi})$. Uma vez que $U(0) \doteq 0$, é imediato que $\psi_0(\vec{\xi}) \doteq 1$. Por fim, conforme mencionado em [28], chamamos de *medida de referência* dP_R a seguinte medida de Poisson

$$dP_R \doteq \frac{z^n}{n!} d^n\mu(x) d^n\nu(\sigma). \quad (1.2.6)$$

Note que a função de partição (1.2.4) é apenas a integral do peso de Boltzmann (1.2.5) com respeito à medida de referência dP_R . Portanto, ainda utilizando a terminologia presente em [28], a razão $\psi_n(\vec{\xi})/\Xi_\Lambda(\beta, z)$ é chamado de *densidade com respeito à medida (de Poisson) de referência*. Vale mencionar que no presente trabalho adotamos condições de fronteira livres, o que significa dizer que, havendo

¹Por vezes denotaremos também $d\rho(\vec{\xi})$ para evidenciar o fato de que $\vec{\xi}$ é um vetor de configuração $\vec{\xi} = (\xi_1, \dots, \xi_n)$.

partículas externas ao volume $|X|$ delimitado na rede, essas partículas não irão interagir com as partículas internas à este volume. Esta condição contrasta à condição adotada em [28], onde as condições de fronteira não são livres.

Algumas propriedades menos gerais da função potencial v são importantes quando queremos garantir certas condições termodinâmicas básicas para o sistema. A definição a seguir caracteriza algumas dessas propriedades, que serão utilizadas oportunamente.

Definição 1.2.4. (*Propriedades da função potencial*) Com a notação acima, o potencial v é dito ser:

- **Regular na origem** se existe $B \geq 0$ tal que

$$|v(0)| \leq 2B < \infty. \quad (1.2.7)$$

- **Somável** se v satisfizer a condição

$$\|v\| \doteq \sup_{\sigma'} \int_{\mathbb{R}^d \times S} d\rho(\xi) |\sigma' \sigma v(x)| < \infty. \quad (1.2.8)$$

- **Positivo** se para quaisquer $x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}^d$ e $z_1, \dots, z_n \in \mathbb{C}$, com $n \geq 1$ vale a desigualdade

$$\sum_{1 \leq i, j \leq n} \bar{z}_i z_j v(|x_i - x_j|) \geq 0, \quad (1.2.9)$$

onde $\bar{z}$ denota o complexo conjugado de z .

- **Estável** se para todo $n \geq 0$ e toda configuração $\vec{\xi} = (\xi_1, \dots, \xi_n)$ existe uma constante $B \geq 0$ tal que

$$U(\xi_1, \dots, \xi_n) \geq -Bn. \quad (1.2.10)$$

■

O formalismo grande-canônico nos permite definir a pressão, densidade e capacidade calorífica de um sistema.

Definição 1.2.5. (*Pressão, densidade e capacidade calorífica*) Com a notação anterior, a pressão p_Λ do sistema, sua densidade ρ_Λ e sua capacidade calorífica c_Λ são definidas respectivamente como:

$$p_\Lambda(\beta, z) \doteq \frac{1}{\beta|X|} \ln \Xi_\Lambda(\beta, z) \quad ; \quad \rho_\Lambda(\beta, z) \doteq z \frac{d}{dz} \left(\frac{\ln \Xi_\Lambda}{|X|} \right) \quad ; \quad c_\Lambda(\beta, z) \doteq \frac{\partial^2 p_\Lambda}{\partial \mu^2} \quad (1.2.11)$$

■

Definição 1.2.6. (*Gás ideal*) Um sistema constituído de uma única espécie de partícula cuja energia potencial $U(x_1, \dots, x_n) \equiv 0$ para todo $(x_1, \dots, x_n) \in X^n$ e todo $n \geq 0$ é chamado de gás ideal. ■

Com as definições 2.2.5 e 2.2.6 acima, podemos calcular a função de partição grande canônica² $\Xi_\Lambda^0(\beta, z)$ de um gás ideal. Com efeito,

$$\Xi_\Lambda^0(\beta, z) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \int_{\Lambda^n} d\rho(\xi_1) \cdots d\rho(\xi_n) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n!} |X|^n = e^{z|X|}. \quad (1.2.12)$$

Conforme (1.2.11), podemos obter a pressão $p_\Lambda^0(\beta, z)$ de um gás ideal calculando o logaritmo de (1.2.12):

$$p_\Lambda^0(\beta, z) = \frac{1}{\beta|X|} \ln e^{z|X|} = \frac{z}{\beta}. \quad (1.2.13)$$

Note ainda que, por conta de (1.2.13), podemos escrever

$$\beta p_\Lambda^0(\beta, z) = \frac{\ln \Xi_\Lambda^0(\beta, z)}{|X|} = z, \quad (1.2.14)$$

de forma que a densidade $\rho_\Lambda^0(\beta, z)$ é dada por

$$\rho_\Lambda^0(\beta, z) = z. \quad (1.2.15)$$

Podemos encontrar $z = z(\rho_\Lambda^0)$ através de (1.2.15) e substituir essa relação em (1.2.14) a fim de relacionar p_Λ^0 e ρ_Λ^0 . Portanto

$$\beta p_\Lambda^0(\beta) = \rho_\Lambda^0(\beta). \quad (1.2.16)$$

A equação (1.2.16) é conhecida como *equação de estado do gás ideal*³. Note que como as relações (1.2.14) e (1.2.15) não dependem do volume, os limites termodinâmicos para a pressão e a densidade de

²Grandezas referentes ao gás ideal serão denotadas por um índice "0" para não causar confusão.

³Substituindo a densidade média $\bar{\rho}^0 \doteq \bar{N}/|X|$ em (1.2.16) obtemos a equação de estado conhecida na literatura como $pV = nRT$.

um gás ideal são dados trivialmente por

$$p(\beta, z) = \lim_{|X| \rightarrow \infty} p_\Lambda(\beta, z) = \frac{z}{\beta} \quad ; \quad \rho(\beta, z) = \lim_{|X| \rightarrow \infty} \rho_\Lambda(\beta, z) = z \quad (1.2.17)$$

A definição 1.2.5 nos mostra que, se pudermos calcular a função de partição $\Xi_\Lambda(\beta, z)$, todas as propriedades termodinâmicas do gás poderão ser obtidas por meio de (1.2.11). Infelizmente, a equação (1.2.4) envolve geralmente integrações bastante complexas. Muitas vezes, podemos utilizar eventuais propriedades de U para garantir a convergência da série (1.2.4), ou mesmo obter alguma aproximação conveniente. Em casos mais gerais, porém, as complicações são evidentes. Dessa forma, procuramos formas alternativas de se estudar a relação (1.2.4), a fim de obter alguma iluminação à respeito dos processos que envolvem o cálculo desta relação. É com esse intuito que começamos a próxima seção.

1.3 Expansões em Clusters e a Série de Mayer

A partir de agora, denotaremos (quando conveniente) $\mathcal{V}(\xi_i, \xi_j) \doteq \sigma_i \sigma_j v(|x_i - x_j|) = \mathcal{V}_{ij}$. Essa notação simplificada será útil para identificarmos padrões que serão úteis na construção da chamada *expansão em clusters para as séries de Mayer*. O leitor interessado pode encontrar [39] uma referência básica sobre esse assunto.

Consideremos um sistema de n partículas que interage via potencial de dois corpos como descrito anteriormente. Podemos escrever (1.2.5) de forma estratégica

$$\psi_n(\vec{\xi}) = e^{-\beta U_n(\vec{\xi})} = e^{-\beta \sum_{1 \leq i < j \leq n} \mathcal{V}_{ij}} = \prod_{1 \leq i < j \leq n} e^{-\beta \mathcal{V}_{ij}}. \quad (1.3.1)$$

A princípio a equação (1.3.1) não nos acrescenta nada novo. Entretanto, fazendo uma mudança de notação adequada, a saber

$$e^{-\beta \mathcal{V}_{ij}} = 1 + f_{ij}, \quad (1.3.2)$$

Onde o termo f_{ij} é chamado de função f de Mayer. A equação (1.3.1) torna-se

$$\psi_n(\vec{\xi}) = \prod_{1 \leq i < j \leq n} (1 + f_{ij}). \quad (1.3.3)$$

Note que $f_{ij} = 0$ se $n = 1$, já que, neste caso, $\psi_1(\vec{\xi}) = 1$.

Figura 1.3: Grafos de ordem 3

A representação acima nos facilita ver a combinatória por trás do produtório dos índices i, j . Com efeito, a título de exemplo, vamos considerar o caso $n = 3$. A equação (1.3.3) nesse caso é dada por

$$\begin{aligned} \prod_{1 \leq i < j \leq 3} (1 + f_{ij}) &= (1 + f_{12})(1 + f_{13})(1 + f_{23}) \\ &= (1 + f_{12} + f_{13} + f_{23} + f_{12}f_{13} + f_{12}f_{23} + f_{13}f_{23} + f_{12}f_{13}f_{23}). \end{aligned} \quad (1.3.4)$$

Agora, consideremos a figura 1.3 na qual estão representados todos os *grafos de ordem 3*. Note que cada termo f_{ij} pode ser identificado como uma ligação $< i, j >$ entre os vértices i, j de um grafo de ordem 3; com efeito, cada termo da soma (1.3.4) representa exatamente um dos 8 grafos de ordem 3 representados acima.

Veja que podemos escrever então, a partir da análise feita acima, a seguinte relação

$$\prod_{1 \leq i < j \leq 3} (t + f_{ij}) = \sum_{G_3} \prod_{< i, j > \in G_3} f_{ij}, \quad (1.3.5)$$

onde G_3 representa todos os grafos de ordem 3 possíveis. De fato, o procedimento acima vale para n qualquer, onde identificaremos os termos f_{ij} em (1.3.4) às ligações $< i, j >$ de grafos G_n de ordem n . Dessa forma, temos

$$\prod_{1 \leq i < j \leq n} (1 + f_{ij}) = \sum_{G_n} \prod_{< i, j > \in G_n} f_{ij}. \quad (1.3.6)$$

Note, entretanto, que a soma $\sum_{G_n}$ em (1.3.6) se dá sobre todos os grafos de ordem n , sem haver distinção entre grafos conexos e não conexos. É interessante, entretanto, transformar essa soma de forma

a decompor as componentes conexas e não conexas. Para isso, vamos adotar a seguir essa abordagem, nos baseando na discussão feita em [13].

Seja $\{I_1, \dots, I_k\}$ uma partição do conjunto de índices $\{1, \dots, n\}$, com $1 \leq k \leq n$. Por partição, entende-se um conjunto de subconjuntos I_j de $\{1, \dots, n\}$ tais que $I_j \neq \emptyset$, $I_i \cap I_j = \emptyset$ se $i \neq j$ e $\bigcup_{j=1}^k I_j = \{1, \dots, n\}$. Denotemos por Π_n o conjunto de todas as partições de $\{1, \dots, n\}$ e por G_{I_j} o conjunto dos grafos conexas cujos vértices são elementos do subconjunto I_j .

Com a notação acima, e definindo $f_{ij} = f_i \equiv 1$ se $|I| = 1$, comecemos nossa análise como feito anteriormente, no caso específico em que $n = 3$ para que possamos entender melhor o raciocínio que será generalizado em seguida. Considere então a tabela 1.1 a seguir:

Tabela 1.1: Partições e Grafos conexas em partições de $\{1, \dots, n\}$

Partição ($n = 3$)	$\sum_{G_{I_j}} \prod_{\langle i,j \rangle \in G_{I_j}} f_{ij}$	$\prod_{j=1}^k \sum_{G_{I_j}} \prod_{\langle i,j \rangle \in G_{I_j}} f_{ij}$
$I_1 = \{1\} ; I_2 = \{2\} ; I_3 = \{3\}$	$f_1 = 1 ; f_2 = 1 ; f_3 = 1$	$f_1 f_2 f_3 = 1$
$I_1 = \{1\} ; I_2 = \{2, 3\}$	$f_1 = 1 ; f_{23}$	$f_1 f_{23} = f_{23}$
$I_1 = \{2\} ; I_2 = \{1, 3\}$	$f_2 = 1 ; f_{13}$	$f_2 f_{13} = f_{13}$
$I_1 = \{3\} ; I_2 = \{1, 2\}$	$f_3 = 1 ; f_{12}$	$f_3 f_{12} = f_{12}$
$I_1 = \{1, 2, 3\}$	$f_{12} f_{13} + f_{12} f_{23} + f_{13} f_{23} + f_{12} f_{13} f_{23}$	$f_{12} f_{13} + f_{12} f_{23} + f_{13} f_{23} + f_{12} f_{13} f_{23}$

Na tabela 1.1 são listadas todas as partições possíveis de $\{1, 2, 3\}$, as somas dos grafos conexas com relação a essas partições e o produto dessas somas, respectivamente. Veja que a soma sobre todas as partições do termo $\prod_{j=1}^k \sum_{G_{I_j}} \prod_{\langle i,j \rangle \in G_{I_j}} f_{ij}$, isto é, a soma de todos os termos da terceira coluna da tabela acima, vale

$$1 + f_{13} + f_{23} + f_{12} + f_{12} f_{13} + f_{12} f_{23} + f_{13} f_{23} + f_{12} f_{13} f_{23},$$

que é precisamente a soma dada em (1.3.4). Portanto, como somar sobre todas as partições possíveis de $\{1, \dots, n\}$ equivale a somar $\sum_{\{I_1, \dots, I_k\} \subset \Pi_n}$, reescrevemos, para n qualquer, a equação (1.3.6) como

$$\sum_{G_n} \prod_{\langle i,j \rangle \in G_n} f_{ij} = \sum_{\{I_1, \dots, I_k\} \subset \Pi_n} \prod_{j=1}^k \left(\sum_{G_{I_j}} \prod_{\langle i,j \rangle \in G_{I_j}} f_{ij} \right). \quad (1.3.7)$$

Perceba que, de fato, o termo entre parênteses em (2.3.7) é uma soma sobre grafos conexos, como queríamos. Substituindo (1.3.2) em (1.3.7) obtemos então

$$\sum_{G_n} \prod_{\langle i,j \rangle \in G_n} f_{ij} = \sum_{\{I_1, \dots, I_k\} \subset \Pi_n} \prod_{j=1}^k \left(\sum_{G_{I_j}} \prod_{\langle i,j \rangle \in G_{I_j}} (e^{-\beta \mathcal{V}_{ij}} - 1) \right). \quad (1.3.8)$$

O termo entre parênteses em (1.3.8) é uma representação da chamada *função de Ursell*, que é denotado por $\psi_n^c(\vec{\xi})$ e é definida a seguir.

Definição 1.3.1. (*Funções de Ursell*) Para cada $i, j \in \{1, \dots, n\}$, sejam $\mathcal{V}_{ij} = \mathcal{V}(\xi_i, \xi_j)$ potencial de interação entre a i -ésima e a j -ésima partícula do sistema e G_n^c o conjunto dos grafos conexos de vértices $\{1, \dots, n\}$ de ordem n . Então a função de Ursell $\psi_n^c(\vec{\xi})$ de ordem n é dada por

$$\psi_n^c(\vec{\xi}) \doteq \begin{cases} 1 & \text{se } n = 1 \\ \sum_{G_n^c} \prod_{\langle i,j \rangle \in G_n^c} (e^{-\beta \mathcal{V}_{ij}} - 1) & \text{se } n \geq 2 \end{cases} \quad (1.3.9)$$

■

Os cálculos feitos acima nos permitem então enunciar um teorema de grande importância⁴:

Teorema 1.3.1. Com a notação acima, vale a igualdade

$$\ln \Xi_\Lambda(\beta, z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \int_{\Lambda^n} d\rho(\xi_1) \cdots d\rho(\xi_n) \psi_n^c(\vec{\xi}). \quad (1.3.10)$$

Demonstração. Podemos escrever

$$\Xi_\Lambda(\beta, z) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \int_{\Lambda^n} d\rho(\xi_1) \cdots d\rho(\xi_n) \psi_n(\vec{\xi}) \quad (1.3.11)$$

e, juntamente com (1.3.11) e (1.3.8), obtemos

$$\Xi_\Lambda(\beta, z) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \int_{\Lambda^n} d\rho(\xi_1) \cdots d\rho(\xi_n) \sum_{\{I_1, \dots, I_k\} \subset \Pi_n} \prod_{j=1}^k \left(\sum_{G_{I_j}} \prod_{\langle i,j \rangle \in G_{I_j}} (e^{-\beta \mathcal{V}_{ij}} - 1) \right). \quad (1.3.12)$$

⁴Ver Primeiro Teorema de Mayer em [39].

Note que, como os índices i, j nos parênteses de (1.3.12) estão sendo tomados sobre o conjunto G_{I_j} dos grafos conexos dos subconjuntos I_j , cada $i, j \in I_j$. Portanto, se ξ_{I_j} denota o vetor de configuração (ξ_i) onde $i \in I_j$, podemos decompor as integrais acima em integrais sobre os conjuntos I_j da seguinte maneira:

$$\int_{\Lambda^n} d\rho(\xi_1) \cdots d\rho(\xi_n) = \int_{\Lambda^{|I_1|}} d\rho(\xi_{I_1}) \cdots \int_{\Lambda^{|I_k|}} d\rho(\xi_{I_k}), \quad (1.3.13)$$

onde, naturalmente, $d\rho(\xi_{I_j}) = \prod_{i \in I_j} d\rho(\xi_i)$. Então, reorganizamos as integrais em (1.3.12) segundo (1.3.13), ou seja

$$\sum_{\{I_1, \dots, I_k\} \subset \Pi_n} \prod_{j=1}^k \int_{\Lambda^{|I_j|}} d^{I_j} \rho(\xi_{I_j}) \left(\sum_{G_{I_j}} \prod_{\langle i, j \rangle \in G_{I_j}} (e^{-\beta \mathcal{V}(\xi_{I_j})} - 1) \right). \quad (1.3.14)$$

Agora, além de I_j ser um conjunto de índice mudo, quando realizadas as integrais acima nas variáveis de configuração adequadas, o resultado final não mais dependerá dessas variáveis. Na verdade, essas integrais dependerão apenas da cardinalidade $|I_j|$, visto que o número de integrais a ser realizado depende da mesma. Lembre ainda que temos o vínculo de que $\bigcup_{j=1}^k I_j = \{1, \dots, n\}$, o que é equivalente a dizer que $\sum_{j=1}^k |I_j| = n$. Portanto, podemos simplificar a notação e escrever

$$\int_{\Lambda^{|I_j|}} d^{I_j} \rho(\xi_{I_j}) \left(\sum_{G_{I_j}} \prod_{\langle i, j \rangle \in G_{I_j}} (e^{-\beta \mathcal{V}(\xi_{I_j})} - 1) \right) = \Phi(|I_j|), \quad (1.3.15)$$

de forma que (1.3.14) se torna:

$$\sum_{\{I_1, \dots, I_k\} \subset \Pi_n} \prod_{j=1}^k \Phi(|I_j|). \quad (1.3.16)$$

Portanto

$$\Xi_\Lambda(\beta, z) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \sum_{\{I_1, \dots, I_k\} \subset \Pi_n} \prod_{j=1}^k \Phi(|I_j|). \quad (1.3.17)$$

Observe agora que podemos escrever

$$\sum_{\{I_1, \dots, I_k\} \subset \Pi_{n,k}} \prod_{j=1}^k \Phi(|I_j|) = \frac{1}{k!} \sum_{\substack{n_1, \dots, n_k: \\ n_1 + \dots + n_k = n}} \prod_{j=1}^k \sum_{\substack{\{I_1, \dots, I_k\}: \\ |I_1| = n_1, \dots, |I_k| = n_k}} \phi(n_j), \quad (1.3.18)$$

onde $\Pi_{n,k}$ representa o conjunto de todas as partições de $\{1, \dots, n\}$ em k subconjuntos e, como existem exatamente $\frac{n!}{n_1! \cdots n_k!}$ partições como estas em subconjuntos $I_1, \dots, I_k$, cujas cardinalidades valham números

fixos $|I_1| = n_1, \dots, |I_k| = n_k$, a relação (1.3.18) se torna

$$\frac{1}{k!} \sum_{\{I_1, \dots, I_k\} \subset \Pi_n} \prod_{j=1}^k \Phi(|I_j|) = \frac{1}{k!} \sum_{\substack{n_1, \dots, n_k: \\ n_1 + \dots + n_k = n}} \prod_{j=1}^k \phi(n_j) \frac{n!}{n_1! \dots n_k!}, \quad (1.3.19)$$

com $\frac{1}{k!}$ fator de normalização para não contarmos termos iguais mais de uma vez. Então, (1.3.17) se torna

$$\begin{aligned} \Xi_\Lambda(\beta, z) &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \sum_{k=1}^n \frac{1}{k!} \sum_{\substack{n_1, \dots, n_k: \\ n_1 + \dots + n_k = n}} \prod_{j=1}^k \phi(n_j) \frac{n!}{n_1! \dots n_k!} \\ &= 1 + \sum_{n=1}^{\infty} z^n \sum_{k=1}^n \frac{1}{k!} \sum_{\substack{n_1, \dots, n_k: \\ n_1 + \dots + n_k = n}} \prod_{j=1}^k \phi(n_j) \frac{1}{n_1! \dots n_k!} \\ &= 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \phi(n) \right]^k. \end{aligned} \quad (1.3.20)$$

Veja que a série presente em (1.3.20) é exatamente a série de Taylor de uma exponencial. De fato, podemos escrever

$$\Xi_\Lambda(\beta, z) = \exp \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \phi(n) \right) \Rightarrow \ln \Xi_\Lambda(\beta, z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \phi(n). \quad (1.3.21)$$

Retornando à representação inicial da $\phi(n)$, com $I_j \equiv \{1, \dots, n\}$ dada pela equação (1.3.15), pela (1.3.21) concluimos finalmente que

$$\ln \Xi_\Lambda(\beta, z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \int_{\Lambda^n} d\rho(\xi_1) \dots d\rho(\xi_n) \left(\sum_{G_n^c} \prod_{\langle i, j \rangle \in G_n^c} (e^{-\beta \mathcal{V}_{ij}} - 1) \right), \quad (1.3.22)$$

o que, em vista de (1.3.9), conclui a demonstração do teorema. $\square$

O Teorema 1.3.1 é importante pois ele nos determina uma relação para $\ln \Xi_\Lambda(\beta, z)$ para um sistema de partículas com energia potencial U qualquer. Note que, por (1.2.11), as grandezas termodinâmicas de interesse são obtidas a partir do logaritmo da função de partição, o que mostra a importância do Teorema 1.3.1. Com efeito, para um sistema qualquer, temos

$$\beta p_\Lambda(\beta, z) = \frac{1}{|X|} \ln \Xi_\Lambda(\beta, z) = \frac{1}{|X|} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \int_{\Lambda^n} d\rho(\xi_1) \dots d\rho(\xi_n) \psi_n^c(\vec{\xi}). \quad (1.3.23)$$

A equação (1.3.23) representa a pressão p_Λ de um sistema finito como série de potências da atividade z . Podemos escrever a série (1.3.23) de maneira simplificada, a saber:

$$\beta p_\Lambda(\beta, z) = \sum_{n=1}^{\infty} b_{\Lambda,n} z^n, \quad (1.3.24)$$

onde, os termos $b_{n,\Lambda}$ são dados por

$$b_{\Lambda,n} = \frac{1}{|X|} \frac{1}{n!} \int_{\Lambda^n} d\rho(\xi_1) \cdots d\rho(\xi_n) \psi_n^c(\vec{\xi}). \quad (1.3.25)$$

A série de potências (1.3.24) recebe o nome de *série de Mayer* e seus coeficientes $b_{\Lambda,n}$ são chamados de *coeficientes de Mayer*.

As séries de Mayer desempenham papel fundamental não só neste texto como em toda a literatura. Sua importância se deve ao fato de que ela é uma ferramenta poderosa para se encontrar equações de estado para sistemas mais gerais, cujos constituintes interagem de forma complexa. Entretanto, como a série de Mayer é uma série de potências, deve-se estudar sua analiticidade e, como consequência, seu *raio de convergência* R_Λ , ou seja, o domínio no qual a série (1.3.24) é convergente. O raio de convergência da série de Mayer é definido, portanto, como

$$R_\Lambda \doteq \lim_{n \rightarrow \infty} b_{n,\Lambda}^{\frac{1}{n}}. \quad (1.3.26)$$

A analiticidade das séries de Mayer está intimamente ligada com fenômenos de transição de fase. De fato, transições de fase são detectadas a partir da não analiticidade de algumas grandezas termodinâmicas de interesse. Portanto, para que possamos encontrar uma equação de estado de um gás com interações conhecidas através de sua série de Mayer, é preciso verificar, por assim dizer, seu domínio de validade.

A representação da série (1.3.24) em termos de grafos conexos de Mayer acaba por não ser conveniente em muitos casos. Para mostrar isso, vamos tentar estimar o raio de convergência de (1.3.24) para potenciais de dois corpos que sejam *não-negativos*, ou seja, que satisfazem $\sigma_i \sigma_j v(x_i - x_j) \geq 0$, $\forall i, j \in \{1, \dots, n\}$. Como vemos de (1.3.25), os coeficientes de Mayer crescem de maneira proporcional aos grafos conexos de Mayer no conjunto $\{1, \dots, n\}$, uma vez que eles dependem da função de Ursell (1.3.9). Da Proposição 1.1.1 da seção anterior, sabemos que o número de grafos conexos B_n no conjunto $\{1, \dots, n\}$ satisfaz a desigualdade

$$B_n \geq 2^{\frac{(n-1)(n-2)}{2}}$$

e portanto, temos

$$\begin{aligned}
|b_{n,\Lambda}| &= \frac{1}{|X|} \frac{1}{n!} \left| \int_{\Lambda^n} d\rho(\xi_1) \cdots d\rho(\xi_n) \psi_n^c(\vec{\xi}) \right| \\
&\leq \frac{1}{|X|} \frac{1}{n!} \int_{\Lambda^n} d\rho(\xi_1) \cdots d\rho(\xi_n) |\psi_n^c(\vec{\xi})| \\
&\leq \frac{1}{|X|} \frac{1}{n!} \int_{\Lambda^n} d\rho(\xi_1) \cdots d\rho(\xi_n) \sum_{G_n^c} 1,
\end{aligned} \tag{1.3.27}$$

onde a desigualdade da segunda para a terceira linha de (1.3.27) se deve ao fato de que, como estamos considerando potenciais estritamente positivos, vale a desigualdade $|e^{-\beta\sigma_i\sigma_j v(x_i-x_j)} - 1| \leq 1$. Assim, (1.3.27) se torna, substituindo a soma $\sum_{G_n^c} 1 = B_n$, proporcional a $\frac{B_n}{n!}$. Segue então que

$$|b_{n,\Lambda}| \leq \frac{B_n}{n!} \sim \frac{2^{n^2}}{n!} \rightarrow \infty \quad \text{quando } n \rightarrow \infty.$$

Note que a passagem da segunda para a última linha em (1.3.27) nos faz perder informação à respeito dos sinais da função de Ursell. Portanto, para se obter a convergência absoluta de (1.3.24), é preciso considerar os sinais de $\psi_n^c(\vec{\xi})$ e os cancelamentos que eles produzem, o que apresenta um alto nível de complexidade, uma vez que teremos que lidar com somas sobre grafos conexos que nos exigem uma combinatória bastante não-trivial e é bastante complicado uma análise geral que tenha como objetivo verificar possíveis cancelamentos internos nessa soma. Uma discussão mais completa desses resultados se encontra em [30].

A discussão dos últimos parágrafos pode ser resumida da seguinte forma: a convergência das séries de Mayer é de grande importância para a mecânica estatística, já que ela nos permite obter conclusões sobre possíveis transições de fase. Porém sua convergência pode ser muito difícil de obtida por cálculo direto através da sua representação em somas em grafos conexos de Mayer. Contudo, essas séries foram (e são) objetos de estudo bastante antigo na literatura e existem alguns resultados e métodos que são, até hoje, referências no assunto. Conforme discutido em [31], nos anos sessenta D. Ruelle [35], O. Penrose [29] e J. Groeneveld [21] provaram a convergência das séries de Mayer para uma classe bastante ampla de potenciais, em especial potenciais estáveis. Esses resultados são, até hoje, tidos como os melhores disponíveis na literatura. Vale notar que muitos outros resultados foram obtidos posteriormente, como por exemplo pode encontrado em [8].

Capítulo 2

Equação do Calor e Derivação da Equação Majorante

Neste capítulo introduzimos novas ferramentas que nos permitem abandonar o formalismo via grafos de Mayer utilizado até aqui, o que nos possibilita ir além das análises feitas até a seção 1.3 e obter novos resultados a respeito das séries de Mayer de sistemas termodinâmicos.

2.1 A representação de Sine Gordon

Nesta seção vamos utilizar alguns objetos definidos no apêndice D para estabelecermos a chamada representação de Sine Gordon. Sejam $X \subset \mathbb{R}^d$ e $g \in D(X)$. Fixado uma configuração de n partículas $\vec{\xi} = (\xi_1, \dots, \xi_n) \in \Lambda^n$, podemos definir a seguinte distribuição, para cada $\xi_j = (x_j, \sigma_j) \in \Lambda$

$$u_{\delta_{x_j}, \sigma_j}(g) \equiv \sqrt{\beta} \sigma_j \langle \delta_{x_j}, g(x) \rangle \doteq \sqrt{\beta} \sigma_j g(x_j). \quad (2.1.1)$$

Como $u_{\delta_{x_j}, \sigma_j} \in D'(X)$, onde $D'(X)$ denota o espaço das distribuições de funções teste em $D(X)$ ¹, a combinação linear

$$\eta_n(\vec{\xi}) \doteq \sqrt{\beta} \sum_{j=1}^n u_{\delta_{x_j}, \sigma_j}(g) = \sqrt{\beta} \sum_{j=1}^n \sigma_j g(x_j) \equiv \langle \eta_n, g \rangle \quad (2.1.2)$$

¹Ver apêndice D

também é uma distribuição, isto é, $\eta_n(\vec{\xi}) \in D'(X)$ e é chamada de *função indicadora da configuração* $\vec{\xi}$.

Suponhamos agora que a função potencial $v = v(x, y)$ pertença à $D(X \times X)$ e satisfaça (1.2.9). A aplicação

$$\begin{aligned} \langle \cdot, v \cdot \rangle : D'(X) \times D'(X) &\rightarrow \mathbb{C} \\ f, g &\rightarrow \langle f \otimes g, v(x, y) \rangle, \end{aligned} \quad (2.1.3)$$

com $v(x, y)$ fixado, foi introduzido no apêndice D (c.f. relação (D.14)) é uma forma bilinear. Além disso, como $v(x, y)$ satisfaz (1.2.9), escolhendo-se $z_i = \bar{z}_j = 1$ para todo i, j nesta última relação, obtemos

$$\sum_{1 \leq i, j \leq n} v(|x_i - x_j|) \geq 0, \quad (2.1.4)$$

o que garante que a aplicação $f, f \rightarrow \langle f, v f \rangle$ definido por (2.1.3) seja uma forma bilinear positiva.

A construção acima se conecta com o formalismo de medidas gaussianas e teoria de probabilidade por meio do chamado teorema de Minlos que, conforme mencionado em [38], é o análogo do teorema de Bochner para processos gaussianos em dimensão infinita.

Teorema 2.1.1. (*Minlos*) *Uma medida μ_g sobre um espaço localmente convexo Y é dita ser gaussiana se, e somente se sua transformada de Fourier, dada por*

$$\hat{\mu}(f) \doteq \int_Y \exp(i\langle f, g \rangle) d\mu(g), \quad (2.1.5)$$

com $f \in X'$, X' denotando o dual topológico de X , tem a forma

$$\hat{\mu}(f) = \exp \left(iL(f) - \frac{1}{2}B(f, f) \right), \quad (2.1.6)$$

onde L é um funcional linear em Y' e B é uma forma bilinear simétrica em Y' de forma que a forma quadrática $f \rightarrow B(f, f)$ é não-negativa.

Conforme mencionado no apêndice D, $D(X)$ é um espaço localmente convexo, de forma que o teorema acima se aplica para o caso em que $Y = D(X)$. Portanto, se $L \equiv 0$, o funcional bilinear $f \rightarrow \langle f, v f \rangle$ define uma medida gaussiana de acordo com (2.1.5).

Sejam $\vec{\xi} = (\xi_1, \dots, \xi_n)$ e $\vec{\xi}' = (\xi'_1, \dots, \xi'_n)$ configurações de n partículas fixadas. Para cada uma dessas configurações, as funções (já definidas) $\eta_n(\vec{\xi}) \equiv \eta_{n, \vec{\xi}}$ e $\eta_n(\vec{\xi}') \equiv \eta_{n, \vec{\xi}'}$ são distribuições em $D'(X)$ e portanto

podemos aplicar o teorema de Minlos no caso particular em que $f \equiv \eta_n(\vec{\xi})$. Note que

$$\begin{aligned} \langle \eta_{n,\xi}, v\eta_{n,\vec{\xi}} \rangle &= \langle \eta_{n,\vec{\xi}} \otimes \eta_{n,\vec{\xi}}, v(x, y) \rangle = \beta \sum_{1 \leq i, j \leq n} \sigma_i \sigma_j v(|x_i - x_j|) \\ &= 2\beta \sum_{1 \leq i < j \leq n} \sigma_i \sigma_j v(|x_i - x_j|) + \beta \sum_{j=1}^n \sigma_j^2 v(0). \end{aligned} \quad (2.1.7)$$

Portanto, utilizando (2.1.5) e (2.1.6), podemos escrever

$$e^{-\frac{1}{2} \langle \eta_{n,\xi}, v\eta_{n,\vec{\xi}} \rangle} = e^{-\beta \sum_{1 \leq i < j \leq n} \sigma_i \sigma_j v(x_i - x_j)} e^{-\frac{\beta}{2} \sum_{j=1}^n \sigma_j^2 v(0)} = \psi_n(\vec{\xi}) e^{-\frac{\beta}{2} \sum_{j=1}^n \sigma_j^2 v(0)}, \quad (2.1.8)$$

e vale a relação:

$$e^{-\frac{1}{2} \langle \eta_{n,\xi}, v\eta_{n,\vec{\xi}} \rangle} = \psi_n(\vec{\xi}) e^{-\frac{\beta}{2} \sum_{j=1}^n \sigma_j^2 v(0)} = \int_{D(X)} \exp(i \langle \eta_n, f \rangle) d\mu_g(f). \quad (2.1.9)$$

A equação (2.1.9) representa uma forma totalmente nova de representar as funções peso de Boltzmann $\psi_n(\vec{\xi})$ em termos de uma integral com respeito à uma medida gaussiana; de fato, basta apenas isolar este termo em (2.1.9). Uma nova notação pode então ser introduzida:

$$\psi_n(\vec{\xi}) = \int_{D(X)} e^{i \langle \eta_n, f \rangle} e^{\frac{\beta}{2} \sum_{j=1}^n \sigma_j^2 v(0)} d\mu_g(f) = \int_{D(X)} : e^{i \langle \eta_n, f \rangle} :_v d\mu_g(f), \quad (2.1.10)$$

de forma que:

$$: e^{i \langle \eta_n, f \rangle} :_v \doteq e^{i \langle \eta_n, f \rangle} e^{\frac{\beta}{2} \sum_{j=1}^n \sigma_j^2 v(0)} \quad (2.1.11)$$

é chamado de *ordenamento de Wick* e representa a inclusão da exponencial do termo de auto-energia.

A relação (2.1.10) é de especial importância pela seguinte razão: através dessa representação de $\psi_n(\vec{\xi})$ podemos obter também uma nova representação para $\Xi_\Lambda(\beta, z)$ em termos de uma medida gaussiana μ_g . Com efeito, vemos que

$$\Xi_\Lambda(\beta, z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \int_{\Lambda^n} \psi_n(\vec{\xi}) d^n \rho(\vec{\xi}) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \int_{\Lambda^n} \left[\int_{D(X)} : e^{i \langle \eta_n, f \rangle} :_v d\mu_g(f) \right] d^n \rho(\vec{\xi}). \quad (2.1.12)$$

Agora, uma vez que vale a identidade

$$\langle \eta_n, f \rangle = \sqrt{\beta} \sum_{j=1}^n \sigma_j f(x_j) \equiv \sqrt{\beta} \sum_{j=1}^n f(\xi_j), \quad (2.1.13)$$

de forma que:

$$e^{i\langle \eta_n, f \rangle} = e^{i\sqrt{\beta} \sum_{j=1}^n f(\xi_j)} = \prod_{j=1}^n e^{i\sqrt{\beta} f(\xi_j)}. \quad (2.1.14)$$

Substituindo (2.1.13) em (2.1.12) obtemos

$$\begin{aligned} \Xi_{\Lambda}(\beta, z) &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \int_{\Lambda^n} \left[\int_{D(X)} \prod_{j=1}^n e^{i\sqrt{\beta} f(\xi_j)} e^{\frac{\beta}{2} \sigma_j^2 v(0)} d\mu_g(f) \right] d^n \rho(\vec{\xi}) \\ &= \int_{D(X)} d\mu_g(f) \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \int_{\Lambda^n} \prod_{j=1}^n e^{i\sqrt{\beta} f(\xi_j) + \frac{\beta}{2} \sigma_j^2 v(0)} d^n \rho(\vec{\xi}) \right] \\ &= \int_{D(X)} d\mu_g(f) \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(z \int_{\Lambda} e^{i\sqrt{\beta} f(\xi) + \frac{\beta}{2} \sigma^2 v(0)} d^n \rho(\xi) \right)^n \right] \\ &= \int_{D(X)} \exp \left(z \int_{\Lambda} : e^{i\sqrt{\beta} f(\xi)} :_v d\rho(\xi) \right). \end{aligned} \quad (2.1.15)$$

Note que a integral que aparece na exponencial da última linha de (2.1.15) é uma integral sobre Λ , ou seja, quando consideramos a configuração de uma única partícula. Por fim, denotamos

$$V_0(f) \doteq z \int_{\Lambda} : e^{i\sqrt{\beta} f(\xi)} :_v d\rho(\xi). \quad (2.1.16)$$

Os cálculos acima nos levam então ao seguinte teorema:

Teorema 2.1.2. (*Transformação de Sine-Gordon*) *Seja $v = v(x, y)$ uma função positiva e continuamente diferenciável nas variáveis posição x, y . Então existe uma medida gaussiana $\mu_g(f)$ em $D(X)$ que é caracterizada pela média nula e covariância $v(x, y)$ e tal que*

$$\Xi_{\Lambda}(\beta, z) = \int_{D(X)} d\mu_g(f) \exp V_0(f). \quad (2.1.17)$$

A relação (2.1.17) é chamada de transformação de Sine-Gordon.

Para concluir esta seção, defina a convolução $(\mu_g * F)(f)$ da medida $\mu_g(f)$ com uma função $F = F(h)$, com $h \in D(X)$, integrável com respeito à medida $\mu_g(f)$ como sendo

$$(\mu_g * F)(h) \doteq \int_{D(X)} d\mu_g(f) F(f + h). \quad (2.1.18)$$

Agora, note que

$$\begin{aligned}
(\mu_g * \exp(V_0))(h) &= \int_{D(X)} d\mu_g(f) \exp \left(z \int_{\Lambda} e^{i\sqrt{\beta}(f(\xi)+h(\xi))+\frac{\beta}{2}\sigma^2 v(0)} d\rho(\xi) \right) \\
&= \int_{D(X)} d\mu_g(f) \exp \left(z e^{i\sqrt{\beta}h(\xi)} \int_{\Lambda} : e^{i\sqrt{\beta}f(\xi)} :_v d\rho(\xi) \right) \\
&= \int_{D(X)} d\mu_g(f) \exp \left(\bar{z} \int_{\Lambda} : e^{i\sqrt{\beta}f(\xi)} :_v d\rho(\xi) \right),
\end{aligned} \tag{2.1.19}$$

com $\bar{z} = z e^{i\sqrt{\beta}h(\xi)}$. Podemos então considerar a relação (2.1.19) uma generalização da função de partição $\Xi_{\Lambda}(\beta, z)$ onde a atividade z é substituída por $\bar{z}$, ou seja

$$(\mu * \exp(V_0))(h) = \Xi_{\Lambda}(\beta, \bar{z}) = \Xi_{\Lambda}(\beta, z e^{i\sqrt{\beta}h(\xi)}). \tag{2.1.20}$$

Se definirmos então o fluxo $V_{\Lambda}(z; h)$ através da relação

$$V_{\Lambda}(z; h) \doteq \ln((\mu * \exp(V_0))(h)) \tag{2.1.21}$$

Acabamos por concluir que

$$\Xi_{\Lambda}(\beta, \bar{z}) = e^{V_{\Lambda}(z; h)}. \tag{2.1.22}$$

Podemos chamar então a equação (2.1.22) de *equação do fluxo*.

2.2 O Formalismo Algébrico

A discussão do final da seção 1.3 esboça a dificuldade em se trabalhar com os coeficientes de Mayer expressos em termos de grafos conexos. De fato, embora tenhamos resultados na literatura para a convergência das séries de Mayer utilizando esse formalismo, em muitos casos a dificuldade é tamanha que se procuram outras abordagens para o mesmo problema. Essa filosofia foi empregada por D. Brydges e T. Kennedy (c.f. [7]) motivados por Göpfert e Mack (c.f. [20]). Motivados pelo trabalho [7], empregaremos essa filosofia também nestas notas, utilizando como base a releitura deste último trabalho feita pelos autores em [23] e [22]. A formulação detalhada será discutida mais adiante; por hora faremos uma apresentação do formalismo algébrico que, embora devido a Ruelle (c.f. [36]), servirá de apoio para essa formulação.

Considere uma rede $X \subset \mathbb{R}^d$ no qual estão contidas infinitas partículas, isto é, cuja configuração é representada por $\vec{\xi} = (\xi_j)_{j \geq 0} \in \prod_{n=1}^{\infty} \Lambda \equiv \Lambda^{\infty}$, com $\xi_j = (x_j, \sigma_j) \in \Lambda$ para todo j . Além disso, fixada uma enumeração para o sistema de infinitas partículas, denotaremos por $P_n \vec{\xi} = (\xi_1, \dots, \xi_n)$ a projeção de $\vec{\xi}$ em um subespaço $\Lambda^n \subset \Lambda^{\infty}$ gerado pelas n primeiras componentes de $\vec{\xi}$. Analogamente, se $I \subset \mathbb{N}$ é um conjunto de índices $I = \{i_1, \dots, i_n\}$ qualquer, escrevemos $P_I \vec{\xi} = (\xi_{i_1}, \dots, \xi_{i_n})$.

Definição 2.2.1. (*Espaço vetorial de sequências, produto de sequências, sequência identidade, sequência nula*) Seja $\mathcal{G}$ o conjunto de todas as sequências $\psi = (\psi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ de funções limitadas e Lebesgue mensuráveis $\psi_n : \Lambda^{\infty} \rightarrow \mathbb{C}$ tais que $\psi_n(\vec{\xi}) = \psi(P_n \vec{\xi})$, simétricas com respeito à permutação de índices $\{1, \dots, n\}$ e onde $\psi_0(\vec{\xi}) = \psi(P_{\emptyset} \vec{\xi}) \in \mathbb{C}$. Definimos em $\mathcal{G}$ operações de soma e multiplicação

$$\psi + \phi \doteq (\psi_n(\vec{\xi}) + \phi_n(\vec{\xi}))_{n \in \mathbb{N}} \quad ; \quad \psi, \phi \in \mathcal{G} \quad (2.2.1)$$

$$\alpha \psi \doteq (\alpha \psi_n(\vec{\xi}))_{n \in \mathbb{N}} \quad ; \quad \alpha \in \mathbb{C}, \psi \in \mathcal{G} \quad (2.2.2)$$

É fácil ver que, munido das operações² (2.2.1) e (2.2.2), $\mathcal{G}$ forma um espaço vetorial sobre $\mathbb{C}$. Além disso, definimos em $\mathcal{G}$ um produto $\circ : \mathcal{G} \times \mathcal{G} \rightarrow \mathcal{G}$ entre quaisquer duas sequências de funções simétricas ψ_1 e ψ_2 como a sequência $\psi_1 \circ \psi_2 = \psi = (\psi_n(\vec{\xi}))_{n \in \mathbb{N}}$ e onde

$$\psi_n(\vec{\xi}) = \sum_{I \subset \{1, \dots, n\}} \psi_1(P_I \vec{\xi}) \psi_2(P_{I^c} \vec{\xi}), \quad (2.2.3)$$

onde $I^c = \{1, \dots, n\} \setminus I$ é o complementar de I com respeito ao conjunto $\{1, \dots, n\}$. Por fim, a sequência identidade $\mathbf{1} = (\delta_n(\vec{\xi}))_{n \in \mathbb{N}}$ é dada por

$$\delta_n(\vec{\xi}) \doteq \begin{cases} 1 & \text{se } n = 0 \\ 0 & \text{se } n \neq 0, \end{cases} \quad (2.2.4)$$

enquanto que a sequência nula $\mathbf{0}$ é definida como a sequência em $\mathcal{G}$ com todas as componentes iguais a zero. ■

Note que utilizamos na definição acima a notação $\psi_n(\vec{\xi})$ para representar funções quaisquer em $\mathcal{G}$ não necessariamente funções peso de Boltzmann. Entretanto, o abuso de notação se dá pelo interesse de construir sequências em $\mathcal{G}$ de pesos de Boltzmann, o que será feito logo adiante.

²Com as operações definidas acima, $\mathcal{G}$ é uma álgebra comutativa (c.f. apêndice B).

Na Definição 2.2.1 fica bem determinado que a zero-ésima componente de uma sequência em $\mathcal{G}$ é um escalar de $\mathbb{C}$. Vamos, de agora em diante, denotar por $\mathcal{G}_0$ o subespaço vetorial das sequências de $\mathcal{G}$ tais que $\psi_0(\vec{\xi}) = 0$. Analogamente, denotaremos por $\mathcal{G}_1$ o subconjunto das sequências de $\mathcal{G}$ tais que $\psi_0(\vec{\xi}) = 1$. Com as notações anteriores, definimos a seguir a exponencial e o logaritmo algébrico.

Definição 2.2.2. (*Exponencial e Logaritmo Algébricos*) A exponencial algébrica $\mathcal{E}xp$ de uma sequência $\phi = (\phi_n)_{n \in \mathbb{N}} \in \mathcal{G}_0$ é um mapa $\mathcal{G}_0 \rightarrow \mathcal{G}_1$ definido por

$$\mathcal{E}xp(\phi) \doteq \mathbf{1} + \phi + \frac{1}{2}\phi \circ \phi + \cdots + \frac{1}{n!} \overbrace{\phi \circ \cdots \circ \phi}^n + \cdots. \quad (2.2.5)$$

Analogamente, o logaritmo algébrico $\mathcal{L}n$ de uma sequência $\phi = (\phi_n)_{n \in \mathbb{N}} \in \mathcal{G}_0$ é um mapa $\mathcal{G}_1 \rightarrow \mathcal{G}_0$ definido por

$$\mathcal{L}n(\mathbf{1} + \phi) \doteq \phi - \frac{1}{2}\phi \circ \phi + \cdots + \frac{(-1)^{n-1}}{n!} \overbrace{\phi \circ \cdots \circ \phi}^n + \cdots. \quad (2.2.6)$$

■

Para simplificar a notação, podemos escrever $\overbrace{\phi \circ \cdots \circ \phi}^n \doteq \phi^{\circ n}$ para sequências $\phi \in \mathcal{G}$, onde $\phi^0 \doteq \mathbf{1}$. Assim, as relações (2.2.5) e (2.2.6) podem ser reescritas como

$$\mathcal{E}xp(\phi) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \phi^{\circ k}, \quad (2.2.7)$$

$$\mathcal{L}n(\mathbf{1} + \phi) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j} (-1)^{j+1} \phi^{\circ j}. \quad (2.2.8)$$

As relações (2.2.7) e (2.2.8) nos remetem às expansões de Taylor para funções reais.

O próximo passo é atribuir ao espaço $\mathcal{G}$ um *produto interno*. Para isso, utilizamos a seguinte definição:

Definição 2.2.3. (*Produto Interno de Sequências*) Um produto interno em $\mathcal{G}$ é uma função $\langle \cdot, \cdot \rangle : \mathcal{G} \times \mathcal{G} \rightarrow \mathbb{C}$ que associa a cada par de sequências $\psi, \phi \in \mathcal{G}$ o escalar

$$\langle \psi, \phi \rangle \doteq \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} \int d^n \rho(\vec{\xi}) \psi_n(\vec{\xi}) \phi_n(\vec{\xi}). \quad (2.2.9)$$

■

Além disso, é interessante termos a noção de *função característica* nesse sentido algébrico.

Definição 2.2.4. (*Função Característica, Sequências Característica*) Seja $\chi_\Lambda(\xi)$ a função característica do conjunto Λ , definida como:

$$\chi_\Lambda(\xi) \doteq \begin{cases} 1 & \text{se } \xi \in \Lambda \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (2.2.10)$$

A sequência $\chi_\Lambda = (\chi_n(\vec{\xi}))_{n \in \mathbb{N}} \in \mathcal{G}$ será chamada de *sequência característica* e suas componentes são definidas por

$$\chi_n(\vec{\xi}) \doteq \prod_{j=1}^n \chi_\Lambda(\xi_j). \quad (2.2.11)$$

■

Note que, partindo das definições (2.2.9) e (2.2.11), concluímos a identidade

$$\langle \chi_\Lambda, \psi \circ \phi \rangle = \langle \chi_\Lambda, \psi \rangle \langle \chi_\Lambda, \phi \rangle. \quad (2.2.12)$$

Voltemos brevemente para a definição das funções de Ursell dada por (1.3.9). Expressamos essas funções em termos dos fatores $e^{-\beta V_{ij}} - 1$, calculados sobre os vértices de grafos conexos; assim, as funções de Ursell tem relação com fatores conexos das funções peso de Boltzmann. Como vimos, entretanto, essa representação em termos de grafos conexos nem sempre é conveniente, visto que a combinatória envolvida nas séries que os envolvem podem ser bastante complexa. Assim, o formalismo algébrico introduzido nesta seção nos permite relacionar esses dois objetos de maneira puramente algébrica. É nesse sentido que a próxima proposição se torna relevante.

Proposição 2.2.1. *Sejam $\psi \in \mathcal{G}_1$ e $\psi^c \in \mathcal{G}_0$ tais que $\psi_1(\xi) = \psi_1^c(\xi) = 1$ e cujos termos $n \geq 2$ são, respectivamente, funções peso de Boltzmann e funções de Ursell de ordem n . Então, é válida a igualdade*

$$\psi = \mathcal{Exp}(\psi^c). \quad (2.2.13)$$

Demonstração. Por conta do Teorema 1.3.1, podemos escrever

$$\ln \Xi_\Lambda(\beta, z) = \langle \chi, \psi^c \rangle, \quad (2.2.14)$$

o que nos permite escrever

$$\Xi_{\Lambda}(\beta, z) = \exp\langle \chi, \psi^c \rangle = 1 + \langle \chi, \psi^c \rangle + \frac{1}{2!} \langle \chi, \psi^c \rangle^2 + \cdots + \frac{1}{n!} \langle \chi, \psi^c \rangle^n + \cdots. \quad (2.2.15)$$

Utilizando a relação (2.2.15), podemos escrever, para cada $n \in \mathbb{N}$

$$\langle \chi, \psi^c \rangle^n = \langle \chi, \overbrace{\psi^c \circ \cdots \circ \psi^c}^n \rangle = \langle \chi, (\psi^c)^{\circ n} \rangle,$$

o que nos leva a reescrever (2.2.15) da seguinte forma

$$\Xi_{\Lambda}(\beta, z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \langle \chi, (\psi^c)^{\circ n} \rangle. \quad (2.2.16)$$

Agora, reescrevemos (2.2.16) colocando cada termo $\frac{1}{n!}$ para dentro do produto interno, de modo a obter

$$\Xi_{\Lambda}(\beta, z) = \langle \chi, \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} (\psi^c)^{\circ n} \rangle = \langle \chi, \mathcal{E}xp(\psi^c) \rangle. \quad (2.2.17)$$

Para concluir a demonstração, basta lembrar que, por definição temos

$$\Xi_{\Lambda}(\beta, z) = \langle \chi, \psi \rangle,$$

e, portanto, segue a tese. □

De agora em diante, salvo menção contrária, utilizaremos as notações ψ e ψ^c para representar, respectivamente, a sequência de funções peso de Boltzmann e a sequência de funções de Ursell introduzidas na Proposição 2.2.1.

2.3 Decomposição em escalas

Na seção 2.1 desenvolvemos uma nova representação para a função de partição $\Xi_{\Lambda}(\beta, z)$ bem como para as funções peso de Boltzmann $\psi_n(\vec{\xi})$ através do uso de medidas gaussianas. O uso dessa ferramenta, entretanto, só foi possível graças à hipótese de positividade da função potencial. As propriedades da função potencial apresentadas na Definição 1.2.4 são, em geral, fundamentais para garantirmos boas propriedades

de objetos a ela associados. Se alguma das propriedades dessa definição não for satisfeita, podemos encontrar dificuldades em garantir a convergência de certas grandezas ou mesmo ficar impossibilitados de desenvolver técnicas poderosas de análise matemática, como é o caso das medidas gaussianas citadas acima.

Antes de continuarmos nossa discussão, é conveniente a seguinte definição:

Definição 2.3.1. (*Potencial de Yukawa*) Considere duas partículas representadas pelos estados $\xi_1 = (x_1, \sigma_1)$ e $\xi_2 = (x_2, \sigma_2)$, onde $\sigma_1, \sigma_2 \in \{-1, +1\}$ e $x_1, x_2 \in X \subset \mathbb{R}^2$. Dizemos que essas partículas interagem via potencial de Yukawa se o potencial de interação $v(|x_1 - x_2|)$ entre elas é dado pela relação

$$v(|x_1 - x_2|) \doteq \frac{\beta}{(2\pi)^2} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{e^{-ik \cdot (x_1 - x_2)}}{k^2 + 1} d^2k \quad k \in \mathbb{R}^2, \quad (2.3.1)$$

que é a função de Green da equação de Laplace $\Delta v = v$, onde Δ representa o operador de Laplace em $\mathbb{R}^2$. Portanto, podemos escrever

$$\mathcal{V}(\xi_1, \xi_2) = \sigma_1 \sigma_2 (-\Delta + 1)^{-1}(x_1 - x_2), \quad (2.3.2)$$

onde $\mathcal{V}(\xi_1, \xi_2) = \sigma_1 \sigma_2 v(|x_1 - x_2|)$. ■

O objetivo central deste trabalho é estudar a convergência da série de Mayer de um sistema de partículas que interage via potencial de Yukawa. Surge então uma primeira dificuldade:

Proposição 2.3.1. *O potencial de Yukawa v dado por (2.3.1) não é regular na origem (c.f definição 1.2.4).*

Demonstração. Analisar o potencial (2.3.1) na origem significa avalia-lo em $x_1 = x_2$ em (2.3.1). Neste caso, teremos

$$\mathcal{V}(\xi, \xi') = \frac{\sigma_1 \sigma_2}{(2\pi)^2} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{1}{k^2 + 1} d^2k. \quad (2.3.3)$$

Como $k \in \mathbb{R}^2$, podemos utilizar a representação polar em $\mathbb{R}^2$, em função das variáveis (r, θ) . Portanto, segue que

$$\begin{aligned} \mathcal{V}(\xi, \xi) &= \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{\sigma^2}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^R \frac{r dr}{r^2 + 1} \\ &= \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{\sigma^2}{4\pi} \int_0^R \frac{2r dr}{r^2 + 1} \\ &= \frac{1}{4\pi} \lim_{R \rightarrow \infty} \ln(R^2 + 1) \rightarrow \infty, \end{aligned} \quad (2.3.4)$$

de onde segue a afirmação. □

A proposição acima mostra que o potencial de Yukawa que estamos interessados vai na contramão dos potenciais descritos no início dessa seção. Para que as ferramentas introduzidas até aqui possam ser utilizadas nesse caso, precisamos encontrar uma forma de regularizar esse potencial, isto é, torna-lo regular na origem. É com esse intuito que D. Brydges e T. Kennedy propõem, em [9] e [7], que funções potencial $\mathcal{V}(\xi, \xi')$ que não satisfaçam a regularidade na origem (como é o caso do potencial de Yukawa) sejam decompostos em escalas, isto é, que incorporem nessas funções um parâmetro real contínuo $t \in [t_0, t_1]$ no qual $\mathcal{V} = \mathcal{V}(t, \xi, \xi')$ é diferenciável em t e satisfaz a condição

$$\mathcal{V}(\xi, \xi') \doteq \int_{t_0}^{t_1} \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{V}(t, \xi, \xi') dt. \quad (2.3.5)$$

Note que (2.3.5) implica que $\mathcal{V}(t, \xi, \xi')$ varia entre a situação onde as partículas não interagem umas com as outras (gás ideal) - $\mathcal{V}(t_0, \xi, \xi') = 0$ - até o potencial original, obtido no valor extremo do intervalo $[t_0, t_1]$ - $\mathcal{V}(t_1, \xi, \xi') = \mathcal{V}(\xi, \xi')$.

Como discutido em [22], um caso particular de regularização consta em incorporar esse parâmetro ao inverso da temperatura β . De fato, basta tomar $t \in [0, \beta]$, onde $v(t, \xi, \xi') = tv(\xi, \xi')$, de forma que vale a igualdade

$$\beta \mathcal{V}(\xi, \xi') = \int_0^\beta \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{V}(t, \xi, \xi') dt. \quad (2.3.6)$$

2.3.1 Regularização do Gás de Yukawa

Seja $\kappa = \kappa(t)$ uma função real, monótona decrescente com $t \in \mathbb{R}$. Suponha que $\kappa(t)$ seja diferenciável em todo ponto de seu domínio e que satisfaça as seguintes condições

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \kappa(t) = \infty \quad \text{e} \quad \kappa(0) = 1. \quad (2.3.7)$$

Considere então que (2.3.1) incorpore a função $\kappa(t)$ da seguinte forma

$$v(t, |x_1 - x_2|) \doteq \frac{\beta}{(2\pi)^2} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{e^{-ik \cdot (x_1 - x_2)}}{k^2 + \kappa(t)} d^2 k. \quad (2.3.8)$$

A decomposição (2.3.8) reproduz a lógica de (2.3.6) com $t_1 = 0$ e $t_0 \rightarrow -\infty$; de fato, é fácil ver que $v(0, |x_1 - x_2|) = v(|x_1 - x_2|)$ e $\lim_{t \rightarrow -\infty} v(t, |x_1 - x_2|) = 0$. Portanto, (2.3.6) nos leva à

$$v(t, |x_1 - x_2|) = v(t, |x_1 - x_2|) - \lim_{t \rightarrow -\infty} v(t, |x_1 - x_2|) = \int_{-\infty}^t \dot{v}(s, |x_1 - x_2|) ds, \quad (2.3.9)$$

onde a notação $\dot{v}(t, |x_1 - x_2|)$ representa a derivada de v com respeito ao parâmetro t . Note que, se $t \in [t_0, 0]$ com t_0 finito fixado, temos

$$v(t, |x_1 - x_2|) - v(t_0, |x_1 - x_2|) = \int_{t_0}^t \dot{v}(s, |x_1 - x_2|) ds < +\infty. \quad (2.3.10)$$

A relação (2.3.10) indica que $\dot{v}$ tenha propriedades de regularidade adequadas. De fato, chegamos ao seguinte resultado

Proposição 2.3.2. *Para cada $t \in [t_0, 0]$ com t_0 finito fixado, $\dot{v} = \dot{v}(t, |x_1 - x_2|) \equiv \dot{v}(t, |x|)$ é um potencial positivo, regular na origem e somável (c.f. definição 1.2.4) satisfazendo*

$$\begin{aligned} \Gamma(t) &\doteq \int_X d\mu(x) |\dot{v}(t, |x|)| = \beta \left(- \frac{d\kappa(t)}{dt} \frac{1}{\kappa^2(t)} \right), \\ \dot{B}(t) &\doteq \frac{1}{2} |\dot{v}(t, 0)| = \frac{\beta}{8\pi} \frac{d}{dt} (-\ln \kappa(t)). \end{aligned} \quad (2.3.11)$$

Demonstração. Ver [22] e [23]. □

Por fim, cabe mencionar que, utilizando a relação (C.9) do apêndice C e denotando $|x_1 - x_2| = |x|$, podemos escrever $\dot{v}$ da seguinte forma,

$$\dot{v}(t, |x|) = \frac{\beta}{4\pi} \frac{d\kappa(t)}{dt} \frac{1}{\sqrt{\kappa(t)}} |x| K'_0(\sqrt{\kappa(t)} |x|), \quad (2.3.12)$$

onde K'_0 denota a derivada com respeito ao parâmetro t da função de Bessel modificada de segunda espécie $K_0(x)$. Essa representação se mostrará útil especialmente quando formos analisar a divergência de $a_2(t)$ para o gás de Yukawa no intervalo de temperatura $\beta \in (4\pi, 6\pi)$ no capítulo seguinte.

Antes de prosseguir para a próxima seção, cabem aqui alguns comentários: a presente seção procurou motivar a inclusão de um parâmetro t de escala no potencial através da análise do potencial de Yukawa. Entretanto, a inclusão desse parâmetro nos possibilitará desenvolver ainda algumas ferramentas interessantes que não terão vínculo direto com esse potencial, mas serão aplicados a este após serem devidamente

estabelecidos. Portanto, embora a inclusão desse parâmetro seja fundamental para aplicarmos nossos resultados a um sistema de partículas que interagem via Yukawa, já que o método dos majorantes demandará potenciais regulares na origem, nossa intenção imediata será estudar algumas propriedades que podemos obter através da inclusão do parâmetro t em um potencial $\mathcal{V}$ de dois corpos satisfazendo as propriedades da Definição 1.2.4 e, só então voltaremos nossa atenção ao potencial de Yukawa propriamente dito, que será então uma aplicação de todos os métodos até aqui estabelecidos, juntamente com aqueles que serão estabelecidos nas próximas seções.

2.4 A equação do Calor

Definição 2.4.1. (*Pesos de Boltzmann Complexos, Sequência de Pesos de Boltzmann Complexos*) Seja $n \in \mathbb{N}$ fixado e t um parâmetro real positivo e contínuo. Considere $v = v(t, x, x')$ uma função potencial diferenciável em t e infinitamente diferenciável nas variáveis posição $x, x' \in \mathbb{R}^d$. Definimos a função peso de Boltzmann complexa (de ordem n) como a aplicação $u_n : \mathbb{R}_+ \times \Lambda^n \rightarrow \mathbb{C}$ dado por

$$u_n(t, \vec{\xi}) \doteq \begin{cases} 1 & \text{se } n = 0 \\ e^{i\sqrt{\beta}\sigma f(x)} & \text{se } n = 1 \\ e^{-\beta \sum_{i < j} \sigma_i \sigma_j v(t, |x_i - x_j|) + i\sqrt{\beta} \sum_{j=1}^n \sigma_j f(x_j)} & \text{se } n \geq 2 \end{cases} \quad (2.4.1)$$

com $f \in D(X)$. A sequência $\mathbf{u}(t, \vec{\xi}) \in \mathcal{G}_1$ cuja n -ésima componente é a função peso de Boltzmann complexa de ordem n , isto é

$$(\mathbf{u}(t, \vec{\xi}))_n = u_n(t, \vec{\xi}), \quad (2.4.2)$$

é chamada de sequência de pesos de Boltzmann complexos. ■

Note que, para $n \geq 2$ fixado, podemos escrever (2.4.1) da seguinte forma

$$u_n(t, \vec{\xi}) = \psi_n(\vec{\xi}) e^{i \sum_{j=1}^n \sigma_j f(x_j)} = \psi_n(\vec{\xi}) e^{i \langle \eta_n, f \rangle}, \quad (2.4.3)$$

o que motiva o nome dado à relação (2.4.1).

Fixados duas configurações de n partículas $\vec{\xi}$ e $\vec{\xi}'$ e suas respectivas funções indicadoras $\eta_{n,\vec{\xi}}$ e $\eta_{n,\vec{\xi}'}$, consideremos novamente a forma bilinear $\langle \eta_{n,\vec{\xi}}, v\eta_{n,\vec{\xi}'} \rangle$, onde v é uma função parâmetro satisfazendo as hipóteses da Definição 2.4.1. Uma vez que v é diferenciável em t , denotando $\dot{v}(t, |x_i - x_j|) \doteq \frac{\partial}{\partial t} v(t, |x_i - x_j|)$, podemos concluir sem dificuldade a identidade

$$\frac{\partial}{\partial t} e^{-\langle \eta_{n,\vec{\xi}}, v\eta_{n,\vec{\xi}'} \rangle + i\langle \eta_n, f \rangle} = - \sum_{1 \leq i, j \leq n} \sigma_i \sigma'_j \dot{v}(t, |x_i - x'_j|) e^{-\langle \eta_{n,\vec{\xi}}, v\eta_{n,\vec{\xi}'} \rangle + i\langle \eta_n, f \rangle}. \quad (2.4.4)$$

Seja $I \in D(X)$ a função $I \equiv 1$ em todo X . Utilizando a relação (D.16) no apêndice D e as considerações lá presentes, podemos escrever $D_I e^{i\langle \eta_{n,\vec{\xi}}, f \rangle} = D_I \langle \eta_{n,\vec{\xi}}, f \rangle e^{i\langle \eta_n, f \rangle} = \sum_{i=1}^n \sigma_i e^{i\langle \eta_{n,\vec{\xi}}, f \rangle}$. Portanto, podemos escrever

$$- \sum_{1 \leq i, j \leq n} \sigma_i \sigma_j \dot{v}(t, |x_i - x_j|) e^{-\langle \eta_{n,\vec{\xi}}, v\eta_{n,\vec{\xi}'} \rangle + i\langle \eta_n, f \rangle} = \frac{1}{\beta} \sum_{1 \leq i, j \leq n} \dot{v}(t, |x_i - x_j|) \frac{\partial}{\partial \delta(x_i)} \frac{\partial}{\partial \delta(x_j)} e^{-\langle f, v f \rangle + i\langle \eta_n, f \rangle}. \quad (2.4.5)$$

A derivada parcial na última linha de (2.4.5) é uma derivada funcional parcial, ou seja, a cada funcional linear $\delta_{x_i}(f)$ ela associa a derivada funcional D_I na direção da função I conforme a equação (D.16). Em suma, aplicar o operador $\partial/\partial \delta(x_i)$ é equivalente à aplicar a derivada (D.16) apenas no funcional $\delta_{x_i}(f)$ em (2.4.5). Isso nos leva a definir então o operador

$$\Delta_{\dot{v}} \doteq \sum_{\substack{1 \leq i, j \leq n \\ i \neq j}} \dot{v}(t, |x_i - x_j|) \frac{\partial}{\partial \delta(x_i)} \frac{\partial}{\partial \delta(x_j)}, \quad (2.4.6)$$

de onde concluímos

$$\frac{\partial u_n(t, \vec{\xi})}{\partial t} = \frac{1}{2} \Delta_{\dot{v}} u_n(t, \vec{\xi}). \quad (2.4.7)$$

A definição abaixo nos permite estender a equação acima, avaliada para n fixado, para toda a sequência.

Definição 2.4.2. (Derivada de Sequências, Laplaciano de Sequências) Seja $\phi \in \mathcal{G}$, com $\phi = \phi(t, \vec{\xi})$ diferenciável em $t \in \mathbb{R}^+$ e continuamente diferenciável nas variáveis posição $x, x' \in X \subset \mathbb{R}^d$. Definimos a derivada $\frac{\partial \phi}{\partial t}$ como sendo a sequência

$$\frac{\partial \phi(t, \vec{\xi})}{\partial t} \doteq \left(\frac{\partial \phi_n(t, \vec{\xi})}{\partial t} \right)_{n \in \mathbb{N}}. \quad (2.4.8)$$

Em outras palavras, a derivada parcial de uma sequência ϕ em relação à t é a sequência das suas derivadas parciais em relação à t . Analogamente, definimos a derivada funcional $\frac{\partial \phi(t, \vec{\xi})}{\partial \delta(x_i)}$ como a sequência

$$\frac{\partial \phi(t, \vec{\xi})}{\partial \delta(x_i)} \doteq \left(\frac{\partial \phi_n(t, \vec{\xi})}{\partial \delta(x_i)} \right)_{n \in \mathbb{N}}. \quad (2.4.9)$$

Por fim, o Laplaciano funcional $\Delta_{\dot{v}} \phi(t, \vec{\xi})$ é definido como³

$$\Delta_{\dot{v}} \phi(t, \vec{\xi}) \doteq (\Delta_{\dot{v}} \phi_n(t, \vec{\xi}))_{n \in \mathbb{N}}, \quad (2.4.10)$$

onde $\Delta_{\dot{v}}$ é dado por (2.4.6). ■

A relação (2.4.7) unida à definição anterior nos leva à seguinte proposição:

Proposição 2.4.1. *A sequência $\mathbf{u}(t, \vec{\xi})$ definida em (2.4.1) é a solução da equação do calor*

$$\frac{\partial \mathbf{u}(t, \vec{\xi})}{\partial t} = \frac{1}{2} \Delta_{\dot{v}} \mathbf{u}(t, \vec{\xi}), \quad (2.4.11)$$

com condição inicial $\mathbf{u}(t_0, \vec{\xi}) \doteq (u_n^0(\vec{\xi}))_{n \in \mathbb{N}}$, $t_0 \in \mathbb{R}^+$ e onde $u_n^0(\vec{\xi}) = e^{i\sqrt{\beta} \sum_{j=1}^n \sigma_j f(x_j)}$.

Uma vez definida a sequência de pesos de Boltzmann complexos, podemos definir a sequência de funções de Ursell complexas, através da relação (2.4.8). Para isso, note que como $\mathbf{u}(t, \vec{\xi}) \in \mathcal{G}_1$ podemos escrever $\mathbf{u}(t, \vec{\xi}) = \mathbf{1} + \mathbf{u}^0(t, \vec{\xi})$ onde $\mathbf{u}^0(t, \vec{\xi}) \in \mathcal{G}_0$.

Definição 2.4.3. (Sequência de Funções de Ursell Complexas) *Com a notação acima, definimos a sequência de funções de Ursell complexa $\mathbf{y} = \mathbf{y}(t, \vec{\xi}) \in \mathcal{G}_0$ como*

$$\mathbf{y}(t, \vec{\xi}) \doteq \mathcal{L}n(\mathbf{1} + \mathbf{u}^0(t, \vec{\xi})). \quad (2.4.12)$$
■

³Podemos também denotar $\Delta_{\dot{v}} \equiv \nabla \cdot \dot{v} \nabla$

Note que

$$\begin{aligned}
(\mathbf{u}(t, \vec{\xi}) \circ \mathbf{u}(t, \vec{\xi}))_n &= \sum_{I \subset \{1, \dots, n\}} u_n(P_I \vec{\xi}) u_n(P_{I^c} \vec{\xi}) \\
&= \sum_{I \subset \{1, \dots, n\}} \psi_n(t, P_I \vec{\xi}) e^{i \sum_{j \in I} \sigma_j f(x_j)} \psi_n(t, P_{I^c} \vec{\xi}) e^{i \sum_{j \in I^c} \sigma_j f(x_j)} \\
&= \sum_{I \subset \{1, \dots, n\}} \psi_n(t, P_I \vec{\xi}) \psi_n(t, P_{I^c} \vec{\xi}) e^{i \sum_{j=1}^n \sigma_j f(x_j)} \\
&= \sum_{I \subset \{1, \dots, n\}} \psi_n(t, P_I \vec{\xi}) \psi_n(t, P_{I^c} \vec{\xi}) e^{i \langle f, \eta_n \rangle} \\
&= (\boldsymbol{\psi}(t, \vec{\xi}) \circ \boldsymbol{\psi}(t, \vec{\xi}))_n e^{i \langle f, \eta_n \rangle}.
\end{aligned} \tag{2.4.13}$$

Denotando $\boldsymbol{\psi}^0(t, \vec{\xi})$ o termo $\mathbf{u}^0(t, \vec{\xi})$ com $f \equiv 0$, podemos concluir

$$\begin{aligned}
(\mathbf{y}(t, \vec{\xi}))_n &= (\mathbf{u}^0(t, \vec{\xi}))_n - \frac{1}{2}(\mathbf{u}(t, \vec{\xi}) \circ \mathbf{u}^0(t, \vec{\xi}))_n + \dots + \frac{(-1)^{n-1}}{n}(\mathbf{u}^0(t, \vec{\xi}))^{on} + \dots \\
&= (\boldsymbol{\psi}^0(t, \vec{\xi}))_n e^{i \langle \eta_n, f \rangle} - \frac{1}{2}(\boldsymbol{\psi}^0(t, \vec{\xi}) \circ \boldsymbol{\psi}^0(t, \vec{\xi}))_n e^{i \langle \eta_n, f \rangle} + \dots + \frac{(-1)^{n-1}}{n}(\boldsymbol{\psi}^0(t, \vec{\xi}))^{on} e^{i \langle \eta_n, f \rangle} + \dots \\
&= e^{i \langle \eta_n, f \rangle} \left((\boldsymbol{\psi}^0(t, \vec{\xi}))_n - \frac{1}{2}(\boldsymbol{\psi}^0(t, \vec{\xi}) \circ \boldsymbol{\psi}^0(t, \vec{\xi}))_n + \dots + \frac{(-1)^{n-1}}{n}(\boldsymbol{\psi}^0(t, \vec{\xi}))^{on} + \dots \right) \\
&= e^{i \langle \eta_n, f \rangle} (\mathcal{L}n(\mathbf{1} + \boldsymbol{\psi}^0(t, \vec{\xi})))_n = e^{i \langle \eta_n, f \rangle} (\mathcal{L}n(\mathcal{E}xp^{\boldsymbol{\psi}^c(t, \vec{\xi})}))_n \\
&= e^{i \langle \eta_n, f \rangle} (\boldsymbol{\psi}^c(t, \vec{\xi}))_n,
\end{aligned} \tag{2.4.14}$$

e, portanto, a definição (2.4.12) é equivalente à trocar a função peso de Boltzmann pela função de Ursell em (2.4.3).

Nosso objetivo agora é encontrar uma equação diferencial para (2.4.12) da mesma forma como encontramos uma equação diferencial para $\mathbf{u}(t, \vec{\xi})$. Para isso, considere o seguinte lema:

Lema 2.4.1. *Com a notação anterior, é válida a relação*

$$\frac{\partial \mathbf{y}(t, \vec{\xi})}{\partial t} \doteq \mathbf{y}_t(t, \vec{\xi}) = \frac{1}{\mathbf{u}(t, \vec{\xi})} \circ \mathbf{u}_t(t, \vec{\xi}), \tag{2.4.15}$$

onde, escrevendo $\mathbf{u}(t, \vec{\xi}) = \mathbf{1} + \mathbf{u}^0(t, \vec{\xi})$, definimos

$$\frac{1}{\mathbf{1} + \mathbf{u}^0(t, \vec{\xi})} \doteq \mathbf{1} - \mathbf{u}^0(t, \vec{\xi}) + \mathbf{u}^0(t, \vec{\xi}) \circ \mathbf{u}^0(t, \vec{\xi}) - \dots + (-1)^n (\mathbf{u}^0(t, \vec{\xi}))^{on} + \dots. \tag{2.4.16}$$

Demonstração. Basta substituir $\mathbf{u}(t, \vec{\xi})$ na definição (2.4.6), utilizar o fato de que a derivada em t da soma de sequências é a soma das derivadas das sequências dessa soma e reagrupar os termos. $\square$

O próximo resultado utiliza o fato de que podemos escrever a relação

$$\mathbf{u}(t, \vec{\xi}) = \mathcal{E}xp(\mathbf{y}(t, \vec{\xi})), \quad (2.4.17)$$

ou seja, vale a inversa algébrica de (2.4.12). Esta identidade não será mostrada aqui. Alguns comentários podem ser encontrados no apêndice B.

O Lema 2.4.1 teve como objetivo mostrar que vale uma regra da cadeia para o caso de derivação de funções algébricas compostas com respeito a um parâmetro real t , assim como vale no caso real. Um resultado análogo acontece quando utilizamos a derivada funcional apresentada em (2.4.6).

Lema 2.4.2. *Com a notação anterior e se $\frac{\partial}{\partial \delta(x_i)}$ é a derivada funcional apresentada em (2.4.6), vale o resultado*

$$\frac{\partial \mathcal{E}xp(\mathbf{y}(t, \vec{\xi}))}{\partial \delta(x_i)} = \mathcal{E}xp(\mathbf{y}(t, \vec{\xi})) \circ \frac{\partial \mathbf{y}(t, \vec{\xi})}{\partial \delta(x_i)}. \quad (2.4.18)$$

Demonstração. A demonstração é análoga à demonstração do Lema 2.4.1, trocando-se $\frac{\partial}{\partial t}$ por $\frac{\partial}{\partial \delta(x_i)}$ e aplicando essa última derivada à exponencial $e^{i\langle f, \eta_m \rangle}$, para n fixado. $\square$

De posse dos últimos resultados, concluímos:

Proposição 2.4.2. *Com a notação anterior, vale a seguinte equação*

$$\frac{\partial \mathbf{y}(t, \vec{\xi})}{\partial t} = \frac{1}{2} \Delta_v \mathbf{y}(t, \vec{\xi}) + \frac{1}{2} \nabla \mathbf{y}(t, \vec{\xi}) \circ \dot{v} \nabla \mathbf{y}(t, \vec{\xi}), \quad (2.4.19)$$

onde

$$(\nabla \mathbf{y}(t, \vec{\xi}) \circ \dot{v} \nabla \mathbf{y}(t, \vec{\xi}))_n \doteq \sum_{\substack{1 \leq i, j \leq n \\ i \neq j}} \dot{v}(t, x_i - x_j) \left(\frac{\partial y_n(t, \vec{\xi})}{\partial \delta(x_i)} \circ \frac{\partial y_n(t, \vec{\xi})}{\partial \delta(x_j)} \right). \quad (2.4.20)$$

Demonstração. A partir do Lema 2.4.1, juntamente com as observações feitas acima, chegamos à relação

$$\frac{\partial \mathbf{y}(t, \vec{\xi})}{\partial t} = \frac{1}{2} \mathcal{E}xp(-\mathbf{y}(t, \vec{\xi})) \circ \Delta_v \mathcal{E}xp(\mathbf{y}(t, \vec{\xi})). \quad (2.4.21)$$

Agora, note que, pelo Lema 2.4.2

$$\Delta_{\dot{v}} \mathcal{E}xp(\mathbf{y}(t, \vec{\xi})) = \nabla \cdot \left(\mathcal{E}xp(\mathbf{y}(t, \vec{\xi})) \circ \dot{v} \nabla \mathbf{y}(t, \vec{\xi}) \right). \quad (2.4.22)$$

Substituindo (2.4.22) em (2.4.21), lembrando que $\mathbf{1} = \mathcal{E}xp(\mathbf{y}(t, \vec{\xi})) \circ \mathcal{E}xp(-\mathbf{y}(t, \vec{\xi}))$, a demonstração se conclui. $\square$

A partir da relação (2.4.19) é possível obter uma relação para as funções de Ursell $\psi_n(t, \vec{\xi})$, para cada $n \in \mathbb{N}$ fixado. De fato, note que, por conta de (2.4.14), tomando $f \equiv 0$ em $\mathbf{y}(t, \vec{\xi})$ recuperamos a sequência de funções de Ursell reais. Portanto, ao se aplicar as derivadas funcionais em (2.4.25) e avaliar toda essa equação em $f \equiv 0$, obteremos um sistema de equações diferenciais para $\psi^c(t, \vec{\xi})$. Com efeito, tomemos, para $n \in \mathbb{N}$ fixado

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \Delta_{\dot{v}} y_n(t, \vec{\xi}) &= \sum_{\substack{1 \leq i, j \leq n \\ i \neq j}} \dot{v}(t, x_i - x_j) \frac{\partial^2 y_n(t, \vec{\xi})}{\partial \delta(x_i) \partial \delta(x_j)} \\ &= \sum_{\substack{1 \leq i, j \leq n \\ i \neq j}} \dot{v}(t, x_i - x_j) \frac{\partial^2}{\partial \delta(x_i) \partial \delta(x_j)} \psi_n(t, \vec{\xi}) e^{i \sum_{j=1}^n \sigma_j f(x_j)} \\ &= - \sum_{\substack{1 \leq i, j \leq n \\ i \neq j}} \sigma_i \sigma_j \dot{v}(x_i - x_j) \psi_n(t, \vec{\xi}) e^{i \sum_{j=1}^n \sigma_j f(x_j)} \\ &\stackrel{f=0}{=} - \sum_{\substack{1 \leq i, j \leq n \\ i \neq j}} \sigma_i \sigma_j \dot{v}(x_i, x_j) \psi_n(t, \vec{\xi}). \end{aligned} \quad (2.4.23)$$

Da mesma forma, concluímos

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{1 \leq i, j \leq n \\ i \neq j}} \dot{v}(t, x_i - x_j) \left(\frac{\partial y_n(t, \vec{\xi})}{\partial \delta(x_i)} \circ \frac{\partial y_n(t, \vec{\xi})}{\partial \delta(x_j)} \right) &\stackrel{f=0}{=} \\ &\stackrel{f=0}{=} - \frac{1}{2} \sum_{I \subset \{1, \dots, n\}} \sum_{i \in I, j \in I^c} \sigma_i \sigma_j \dot{v}(t, x_i - x_j) \psi^c(t, P_I \vec{\xi}) \psi^c(t, P_{I^c} \vec{\xi}), \end{aligned} \quad (2.4.24)$$

onde $\psi^c(t, P_I \vec{\xi}) = 1$ se $|I| = 1$. Denotando $\sum_{i \in I, j \in I^c} \sigma_i \sigma_j \dot{v}(t, x_i - x_j) = \dot{U}(t, P_I \vec{\xi}, P_{I^c} \vec{\xi})$ e substituindo (2.4.23) e (2.4.24) em cada (2.4.18) para cada $n \in \mathbb{N}$, $n \geq 2$ fixo, obtemos um sistema de equações diferenciais ordinárias para cada $\psi_n(t, \vec{\xi})$, dada por

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi_n^c(t, \vec{\xi}) = -\dot{U}(t, \vec{\xi}) \psi_n^c(t, \vec{\xi}) - \frac{1}{2} \sum_{I \subset \{1, \dots, n\}} \dot{U}(t, P_I \vec{\xi}, P_{I^c} \vec{\xi}) \psi^c(t, P_I \vec{\xi}) \psi^c(t, P_{I^c} \vec{\xi}). \quad (2.4.25)$$

Restringindo t a um intervalo $[t_0, t_1]$ como feito na seção anterior, (2.4.25) admite a condição inicial

$$\psi_n^c(t_0, \vec{\xi}) = \begin{cases} 1 & \text{se } |I| = 1 \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (2.4.26)$$

É fácil ver que $\psi_0^c(t, \vec{\xi}) = 0$ e $\psi_1^c(t, \vec{\xi}) = 1$ para todo $t \in [t_0, t_1]$, coincidindo com a definição de sequência de funções de Ursell, de forma que não consideraremos estes dois casos simples.

Podemos aplicar o método da variação das constantes para explicitar a solução formal da equação diferencial ordinária (2.4.25)

$$\psi_n^c(t, \vec{\xi}) = -\frac{1}{2} \int_{t_0}^t ds e^{-\int_s^t d\tau \dot{U}_n(\tau, \vec{\xi})} \sum_{I \subset \{1, \dots, n\}} \dot{U}(s, P_I \vec{\xi}, P_{I^c} \vec{\xi}) \psi^c(s, P_I \vec{\xi}) \psi^c(s, P_{I^c} \vec{\xi}) \quad n \geq 2. \quad (2.4.27)$$

Note que a equação (2.4.27) é uma equação de recorrência: dados $\psi_1^c(t, \vec{\xi}), \dots, \psi_{n-1}^c(t, \vec{\xi})$ é possível obter $\psi_n^c(t, \vec{\xi})$. Além disso, as partições com $I = \emptyset$ e $I = \{1, \dots, n\}$ tem contribuições nulas nesta relação.

Exemplo 2.4.1. Vamos calcular $\psi_n^c(t, \vec{\xi})$ utilizando a fórmula de recursão (2.4.27) para $n = 2$. Lembrando que $\psi^c(t, P_\emptyset \vec{\xi}) = \psi_0^c(t, \vec{\xi}) \doteq 0$, as partições possíveis para $\{1, 2\}$ são $\emptyset, \{1\}, \{2\}, \{1, 2\}$, o que nos leva à soma

$$\begin{aligned} & \sum_{I \subset \{1, 2\}} \dot{U}(t, P_I \vec{\xi}, P_{I^c} \vec{\xi}) \psi^c(t, P_I \vec{\xi}) \psi^c(t, P_{I^c} \vec{\xi}) = \\ & \dot{U}(t, P_{\{1\}} \vec{\xi}, P_{\{2\}} \vec{\xi}) \psi^c(t, P_{\{1\}} \vec{\xi}) \psi^c(t, P_{\{2\}} \vec{\xi}) + \dot{U}(t, P_{\{2\}} \vec{\xi}, P_{\{1\}} \vec{\xi}) \psi^c(t, P_{\{2\}} \vec{\xi}) \psi^c(t, P_{\{1\}} \vec{\xi}) \\ & = 2\sigma_1 \sigma_2 \dot{v}(t, x_1 - x_2), \end{aligned}$$

já que $\psi^c(t, P_I \vec{\xi}) \doteq 1$ se $|I| = 1$. Portanto, segue

$$\begin{aligned} \psi_2^c(t, \vec{\xi}) &= - \int_{t_0}^t ds e^{-\int_s^t d\tau \sigma_1 \sigma_2 \dot{v}(\tau, x_1 - x_2)} \sigma_1 \sigma_2 \dot{v}(t, x_1 - x_2) = \\ &= - \int_{t_0}^t ds \left[e^{-\int_s^t d\tau \sigma_1 \sigma_2 \dot{v}(\tau, x_1 - x_2)} \frac{d}{ds} \int_s^t d\tau \sigma_1 \sigma_2 \dot{v}(\tau, x_1 - x_2) \right] \\ &= e^{-\int_{t_0}^t d\tau \sigma_1 \sigma_2 \dot{v}(\tau, x_1 - x_2)} - 1, \end{aligned} \quad (2.4.28)$$

que vai de acordo com a definição de Mayer (1.3.9).

2.5 Equação Diferencial do Majorante

Nas últimas seções, introduzimos alguns conceitos de mecânica estatística e algumas ferramentas que nos possibilitam estudar esses conceitos de um ponto de vista mais rigoroso. Essas ferramentas foram introduzidas com o objetivo de contextualizar alguns dos problemas que iremos discutir, embora elas não sejam utilizadas de maneira direta neste trabalho. Não há problema algum em se valer dessas técnicas para se estudar o gás de Yukawa bidimensional, que é o objeto central deste trabalho, como discutido na seção 2.3. Entretanto, como exemplificado no final da seção 1.3, trabalhar com expansões em grafos conexos pode se tornar bastante complicado, visto que muitas vezes nos depararemos com processos combinatórios bastante complexos, como é o caso, por exemplo, da representação das funções de Ursell através da relação (1.3.9). A preocupação em se lidar com problemas combinatórios não triviais já estava presente quando começamos a introduzir o formalismo algébrico na seção 2.2, formalismo esse devido à D. Ruelle (c.f. [36]). O produto de sequências (2.2.3) acaba por incorporar o caráter combinatório das expansões em grafos da seção 1.3, o que mostra que ambos os formalismos acabam por ser equivalentes.

Ao compararmos a relação (2.4.27) com a relação (1.3.9), fica clara a diferença entre as abordagens via formalismo algébrico e via expansões em grafos. A representação (2.4.27) das funções de Ursell não explicita o caráter combinatório, nos oferecendo, alternativamente, ferramentas de equações diferenciais para o estudo das séries de Mayer. Conforme já mencionado, embora o formalismo algébrico seja devido a Ruelle, a proposta de se utilizar esse formalismo a fim de obter equações diferenciais ordinárias para $\psi_n^c(\vec{\xi})$ foi introduzida por D. Brydges e T. Kennedy em dois trabalhos principais, a saber [9] e [8]. Cabe aqui mencionar que a introdução de ferramentas algébricas para o estudo das séries de Mayer conforme feito pelos autores previamente citados vai muito além de simplesmente incorporar o caráter combinatório das expansões em grafos. Na verdade, essa nova ferramenta nos possibilita decompor o potencial v em diversas escalas, conforme visto na seção 2.3, e analisar o problema inicial (não regularizado) por meio da análise dos casos limites. Essa decomposição em escalas não seria funcional no formalismo via grafos de Mayer, uma vez que poderíamos apenas considerar uma escala por vez. Além disso, como os cálculos via grafos de Mayer não tem vínculo com a inclusão do parâmetro t , a retirada desse parâmetro teria como único efeito o retorno do potencial regularizado para o potencial não regularizado. Portanto, os trabalhos de Brydges e Kennedy representaram um grande avanço na forma de analisar a convergência das séries de

Mayer, já que podemos, à partir deste formalismo, analisar diversas escalas distintas do potencial, o que nos permite obter também funções de Ursell em diversas escalas. Assim, motivados por esses trabalhos, D. Marchetti e L. Guidi introduzem em [22] e [23] uma releitura dos trabalhos de Brydges e Kennedy, propondo novos resultados. Esta dissertação é baseada, principalmente, nestes dois trabalhos de Marchetti e Guidi. Assim, nesta seção, passamos não mais a introduzir ferramentas, mas sim explorar os resultados obtidos nas seções 2.3 e 2.4 a fim de aplica-los ao gás de Yukawa bidimensional à maneira que os dois trabalhos citados anteriormente o fazem.

Vamos esboçar quais os objetivos nesta e nas próximas seções. A equação (2.4.11) nos fornece, de maneira recursiva, cada uma das funções de Ursell de ordem n . Esse resultado é notável, visto que essas funções são a chave para conseguir obter raios de convergência das séries de Mayer, já que os coeficientes de Mayer $b_{n,\Lambda}$ dependem diretamente dessas funções. Entretanto, essa equação, mais uma vez, não é simples de ser estudada, e requer um procedimento recursivo que não nos interessa aplicar no presente momento. Surge então uma nova ideia: não buscaremos obter cada função de Ursell $\psi_n(t, \vec{\xi})$ propriamente, mas sim utilizaremos (2.4.11) para *majorar* cada uma dessas funções. A utilidade desse método é imediata: majorar $\psi_n(t, \vec{\xi})$ significa, em algum sentido, majorar os coeficientes $b_{n,\Lambda}$, de forma que podemos pensar em uma série de potências alternativa à série de Mayer mas que majora esta última e, portanto, representa a expansão de uma função analítica majorante da pressão do sistema e a qual denotaremos por $\Phi = \Phi(t, z)$. Por fim, utilizaremos a representação (formal) da série de potências majorante para obter a equação diferencial satisfeita por Φ . Com isso, é possível obter Φ e estudar suas propriedades; essas propriedades poderão nos gerar informação à respeito da convergência da série de Mayer propriamente dita.

Vamos começar essa seção definindo rigorosamente o que vem a ser um *majorante*. Os cálculos desta seção foram baseados, principalmente, no trabalho (não publicado) [23]. Explicitaremos, entretanto, alguns detalhes que foram omitidos nesta referência.

Definição 2.5.1. (*Majorante*) *Seja $g : [a, b] \times \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ uma função analítica no disco aberto $D_R \doteq \{z \in \mathbb{C}, |z| < R\}$. Então g admite uma representação em série de potências em $[a, b] \times D_R$*

$$g(t, z) = \sum_{j=0}^{\infty} G_j(t) z^j,$$

com $G_j : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$, para todo $j \in \mathbb{N}$. Considere agora uma função $f : [a, b] \times \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$, analítica em D_R e

com representação

$$f(t, z) = \sum_{j=0}^{\infty} F_j(t) z^j,$$

onde $F_j : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$. Dizemos que g é um majorante uniforme de f se vale a desigualdade

$$|F_j(t)| \leq G_j(t) \quad \forall j \in \mathbb{N}, \forall t \in [a, b]$$

e escrevemos $f \leq g$ para indicar que g majora f uniformemente. ■

A partir de agora, vamos fixar $n \in \mathbb{N}$ em todo o resto desta seção. Para algum $j \leq n$, definimos o seguinte objeto

$$a_n(t, \vec{\xi}) \doteq \sup_{\xi_k} \int_{\Lambda^{n-1}} \prod_{\substack{1 \leq i \leq n \\ i \neq k}} d\rho(\xi_i) |\psi_n^c(t, \vec{\xi})|, \quad (2.5.1)$$

onde $a_1(t, \vec{\xi}) \doteq 1$, para todo $t \in [t_0, t]$. Note que os coeficientes $a_n(t, \vec{\xi})$ acima são baseados em (1.3.26) e, uma vez que $t \in [t_0, t]$ não altera o sinal da função potencial v , segue que $a_n(t, \vec{\xi})$ é diferenciável em todo t nesse intervalo. Além disso, como as funções $\psi_n(t, \vec{\xi})$ vem acompanhadas do módulo em (2.5.1), isso torna⁴ $b_{n,\Lambda} \leq \frac{1}{n!} a_n(t, \vec{\xi})$. Poderíamos pensar em utilizar os coeficientes $a_n(t, \vec{\xi})$ para construir uma nova série de potências, nas quais analisaríamos a convergência, tal como discutido anteriormente. Entretanto, esse não será o caso: de fato, os coeficientes $a_n(t, \vec{\xi})$ podem ser muito mais complicados de serem calculados do que a equação (2.4.28) propriamente dita. Podemos, entretanto, utilizar essa última equação para *majorar* cada um dos $a_n(t, \vec{\xi})$, o que nos levará a majorar cada $b_{n,\Lambda}$, por consequência. Com isso, temos, se $n \geq 2$

$$|\psi_n^c(t, \vec{\xi})| \leq \frac{1}{2} \int_{t_0}^t ds e^{-\int_s^t d\tau \dot{U}_n(\tau, \vec{\xi})} \sum_{I \subset \{1, \dots, n\}} |\dot{U}(s, P_I \vec{\xi}, P_{I^c} \vec{\xi})| |\psi^c(s, P_I \vec{\xi})| |\psi^c(s, P_{I^c} \vec{\xi})|. \quad (2.5.2)$$

Aqui, há um fato importante que deve ser mencionado: a equação (2.4.27) foi obtida utilizando apenas a hipótese de diferenciabilidade sobre as variáveis x, x' e o parâmetro t da função potencial v . Além disso, discutimos na seção 2.3 que a inclusão do parâmetro t visa garantir que esse potencial seja regular na

⁴Embora continuemos escrevendo, por simplicidade, $b_{n,\Lambda}$ para os coeficientes de Mayer, é bom lembrar que a incorporação de um parâmetro t na função potencial, como feito a partir da seção 2.3, faz incorporar também um parâmetro t em $b_{n,\Lambda}$.

origem. Agora, note que o objeto que aparece *diretamente* na equação (2.4.27) e na inequação (2.5.2) não é mais a função potencial v mas sim sua derivada $\dot{v}$ (e, por consequência, a energia $\dot{U}$). Precisamos então de alguma hipóteses a respeito desses objetos, do contrário não iremos muito longe ao tentarmos majora-los. Assumiremos então as seguintes hipóteses para $\dot{U}$:

1. **(Estabilidade)** Para todo $n \geq 0$ e todo $\xi_1, \dots, \xi_n$ existe $\dot{B}(t) \geq 0$ tal que

$$\dot{U}(\xi_1, \dots, \xi_n) \geq -\dot{B}(t)n. \quad (2.5.3)$$

2. **(Somabilidade)** $\dot{v} = \dot{v}(t, \xi, \xi')$ satisfaz a condição

$$\Gamma(t) \doteq \sup_{\sigma'} \int_{\Lambda} d\rho(\xi) |\sigma' \sigma \dot{v}(t, x)| < \infty. \quad (2.5.4)$$

A relação (2.5.3) nos leva a uma primeira majoração importante

$$-\int_s^t d\tau \dot{U}_n(\tau, \vec{\xi}) \leq n \int_s^t \dot{B}(\tau) d\tau \doteq n\gamma(s, t), \quad (2.5.5)$$

de forma que (2.5.2) é levada então à seguinte relação

$$|\psi_n(t, \vec{\xi})| \leq \frac{1}{2} \int_{t_0}^t ds e^{n\gamma(s, t)} \sum_{I \subset \{1, \dots, n\}} |\dot{U}(s, P_I \vec{\xi}, P_{I^c} \vec{\xi})| |\psi^c(s, P_I \vec{\xi})| |\psi^c(s, P_{I^c} \vec{\xi})|. \quad (2.5.6)$$

Agora, vamos unir as equações (2.5.1) e (2.5.6). Isso nos leva à seguinte relação

$$\begin{aligned} a_n(t, \vec{\xi}) &\leq \sup_{\xi_k} \int_{\Lambda^{n-1}} \prod_{\substack{1 \leq i \leq n \\ i \neq k}} d\rho(\xi_i) \frac{1}{2} \int_{t_0}^t ds e^{n\gamma(s, t)} \sum_{I \subset \{1, \dots, n\}} |\dot{U}(s, P_I \vec{\xi}, P_{I^c} \vec{\xi})| |\psi^c(s, P_I \vec{\xi})| |\psi^c(s, P_{I^c} \vec{\xi})| \\ &\leq \sup_{\xi_k} \int_{\Lambda^{n-1}} \prod_{\substack{1 \leq i \leq n \\ i \neq k}} d\rho(\xi_i) \frac{1}{2} \int_{t_0}^t ds e^{n\gamma(s, t)} \sum_{I \subset \{1, \dots, n\}} \sum_{l \in I, j \in I^c} |\sigma_l \sigma_j \dot{v}(t, |x_l - x_j|)| |\psi^c(s, P_I \vec{\xi})| |\psi^c(s, P_{I^c} \vec{\xi})| \\ &= \frac{1}{2} \sup_{\xi_k} \int_{t_0}^t ds e^{n\gamma(s, t)} \int_{\Lambda^{n-1}} \prod_{\substack{1 \leq i \leq n \\ i \neq k}} d\rho(\xi_i) \sum_{I \subset \{1, \dots, n\}} \sum_{l \in I, j \in I^c} |\sigma_l \sigma_j \dot{v}(t, |x_l - x_j|)| |\psi^c(s, P_I \vec{\xi})| |\psi^c(s, P_{I^c} \vec{\xi})|. \end{aligned} \quad (2.5.7)$$

Vamos analisar agora, cuidadosamente, a segunda integral presente na última relação de (2.5.7). Para isso, vamos supor sem perda de generalidade que o índice k presente na variável configuração ξ_k no qual o supremos nesta relação está sendo calculado, seja tal que $k \in I^c$. Portanto, para cada par l, j de índices

presente na função potencial $\dot{v}(t, |x_l - x_j|)$, podemos majorar mais uma vez (2.5.7) calculando o supremo de $|\psi^c(s, P_I \vec{\xi})|$ sobre a configuração ξ_j . Repare que isso irá desacoplar a variável ξ_j das funções $\dot{v}$ e $\psi^c(P_I \vec{\xi})$, de forma que apenas $\dot{v}$ será integrada nessa variável. Como $\dot{v}$ é invariante por translação, utilizamos a desigualdade a seguir

$$\sup_{\sigma'} \int_{\Lambda} d\rho(\xi) |\sigma' \sigma \dot{v}(t, |x|)| \leq \sup_{\sigma'} \int_{\mathbb{R}^d \times S} d\rho(\xi) |\sigma' \sigma \dot{v}(t, x)| < \infty, \quad (2.5.8)$$

juntamente com (2.5.4) podemos então proceder da seguinte forma

$$\begin{aligned} & \sup_{\xi_k} \int_{\Lambda^{n-1}} \prod_{\substack{1 \leq i \leq n \\ i \neq k}} d\rho(\xi_i) \sum_{I \subset \{1, \dots, n\}} \sum_{l \in I, j \in I^c} |\sigma_l \sigma_j \dot{v}(t, |x_l - x_j|)| |\psi^c(s, P_I \vec{\xi})| |\psi^c(s, P_{I^c} \vec{\xi})| \\ & \leq \sup_{\xi_k} \sum_{I \subset \{1, \dots, n\}} \sum_{l \in I, j \in I^c} \int_{\Lambda^{|I^c|-1}} \prod_{\substack{i \in I^c \\ i \neq k}} d\rho(\xi_i) |\sigma_l \sigma_j \dot{v}(t, |x_l - x_j|)| |\psi^c(s, P_{I^c} \vec{\xi})| \sup_{\xi_j} \int_{\Lambda^{|I|-1}} \prod_{\substack{p \in I \\ p \neq j}} d\rho(\xi_i) |\psi^c(s, P_I \vec{\xi})| \\ & \leq \sup_{\xi_k} \sum_{I \subset \{1, \dots, n\}} \sum_{l \in I, j \in I^c} \int_{\Lambda^{|I^c|-1}} \prod_{\substack{i \in I^c \\ i \neq k}} d\rho(\xi_i) \Gamma(t) |\psi^c(s, P_{I^c} \vec{\xi})| \sup_{\xi_j} \int_{\Lambda^{|I|-1}} \prod_{\substack{p \in I \\ p \neq j}} d\rho(\xi_i) |\psi^c(s, P_I \vec{\xi})| \\ & = \sum_{I \subset \{1, \dots, n\}} \sum_{l \in I, j \in I^c} \Gamma(t) \sup_{\xi_k} \int_{\Lambda^{|I^c|-1}} \prod_{\substack{i \in I^c \\ i \neq k}} d\rho(\xi_i) |\psi^c(s, P_{I^c} \vec{\xi})| \sup_{\xi_j} \int_{\Lambda^{|I|-1}} \prod_{\substack{p \in I \\ p \neq j}} d\rho(\xi_i) |\psi^c(s, P_I \vec{\xi})|. \end{aligned} \quad (2.5.9)$$

A última linha de (2.5.9) possui termos familiares à relação (2.5.1), o que nos motiva a definir o seguinte objeto

$$a_I(t, \vec{\xi}) \doteq \sup_{\xi_j} \int_{\Lambda^{|I|-1}} \prod_{\substack{i \in I \\ i \neq j}} \rho(\xi_i) |\psi^c(t, P_I \vec{\xi})|, \quad (2.5.10)$$

de forma que (2.5.7) pode ser reescrita como

$$a_n(t, \vec{\xi}) \leq \frac{1}{2} \int_{t_0}^t ds e^{n\gamma(s,t)} \Gamma(s) \sum_{I \subset \{1, \dots, n\}} |I| |I^c| a_I(t, \vec{\xi}) a_{I^c}(t, \vec{\xi}), \quad (2.5.11)$$

onde as cardinalidades $|I|$ e $|I^c|$ apareceram em (2.5.11) devido à soma $\sum_{l \in I, j \in I^c}$ presente em (2.5.9).

A relação (2.5.11) possui uma soma sobre as partições de $\{1, \dots, n\}$. Essa soma carrega consigo uma combinatória bastante fundamental, mas que pode não ser percebida de imediato. Vamos analisa-la

separadamente: seja a a cardinalidade do conjunto $I \subset \{1, \dots, n\}$ e b a cardinalidade do seu complementar, I^c . Se começarmos com I preenchendo todo o conjunto de índices $\{1, \dots, n\}$, isto é, $I = \{1, \dots, n\}$, teremos que $I^c = \emptyset$, de onde concluiremos que, nesse caso, $a = n$ e $b = 0$. Agora, vamos proceder diminuindo, sucessivamente, um a um os elementos de I e analisar a soma $\sum_{I \subset \{1, \dots, n\}} |I| |I^c|$. Se $a = n - 1$, então existem $\frac{n!}{(n-1)!1!}$ possibilidades de conjuntos em $\{1, \dots, n\}$. Se $a = n - 2$, existem $\frac{n!}{(n-2)!2!}$ possibilidades de conjuntos, e assim sucessivamente. Concluímos, com esse raciocínio, a seguinte identidade⁵

$$\sum_{I \subset \{1, \dots, n\}} |I| |I^c| a_I a_{I^c} = \sum_{k=1}^{n-1} \frac{n!}{(n-k)!k!} a_k k a_{n-k} (n-k). \quad (2.5.12)$$

Dessa forma, substituindo (2.5.12) em (2.5.11) obtemos

$$a_n(t, \vec{\xi}) \leq \frac{1}{2} \int_{t_0}^t ds e^{n\gamma(s,t)} \Gamma(s) \sum_{k=1}^{n-1} n! k (n-k) \Gamma(s) \frac{a_k(s, \vec{\xi})}{k!} \frac{a_{n-k}(s, \vec{\xi})}{(n-k)!}. \quad (2.5.13)$$

Através de (2.5.13), chegamos à desigualdade

$$\begin{aligned} \frac{a_n(t, \vec{\xi})}{n!} &\leq \frac{1}{n!} \frac{1}{2} \int_{t_0}^t ds e^{n\gamma(s,t)} \sum_{k=1}^{n-1} n! k (n-k) \Gamma(s) \frac{a_k(s, \vec{\xi})}{k!} \frac{a_{n-k}(s, \vec{\xi})}{(n-k)!} \\ &\leq \frac{1}{2} \int_{t_0}^t ds e^{n\gamma(s,t)} \sum_{k=1}^{n-1} k (n-k) \Gamma(s) \frac{a_k(s, \vec{\xi})}{k!} \frac{a_{n-k}(s, \vec{\xi})}{(n-k)!}. \end{aligned} \quad (2.5.14)$$

A equação (2.5.14) é, então, um bom ponto de partida para construirmos a série de potências Φ introduzida no começo desta seção. Definimos os coeficientes $A_n(t, \vec{\xi})$ como os coeficientes $\frac{1}{n!} a_n(t, \vec{\xi})$ nos quais a última desigualdade de (2.5.14) é uma igualdade, ou seja

$$A_n(t, \vec{\xi}) \doteq \frac{1}{2} \int_{t_0}^t ds e^{n\gamma(s,t)} \sum_{k=1}^{n-1} k (n-k) \Gamma(s) A_k(s, \vec{\xi}) A_{n-k}(s, \vec{\xi}), \quad (2.5.15)$$

onde $A_1(t, \vec{\xi}) \doteq 1$, para todo $t \in [t_0, t]$. Portanto, $\Phi = \Phi(t, z)$ é dada pela série de potências

$$\Phi(t, z) \doteq \sum_{n=1}^{\infty} A_n(t, \vec{\xi}) z^n. \quad (2.5.16)$$

⁵Como os coeficientes $a_I(t, \vec{\xi})$ e $a_{I^c}(t, \vec{\xi})$ dependem da cardinalidade de I e I^c , respectivamente, vamos denota-los, de agora em diante, $a_k(t, \vec{\xi})$ e $a_{n-k}(t, \vec{\xi})$.

Vamos agora escrever explicitamente $\Phi(t, z)$ e trabalhar com alguns dos coeficientes de (2.5.15)

$$\begin{aligned}\Phi(t, z) &= z + \sum_{n=2}^{\infty} A_n(t, \vec{\xi}) z^n = z + \sum_{n=2}^{\infty} \left(\frac{1}{2} \int_{t_0}^t ds e^{n\gamma(s,t)} \sum_{k=1}^{n-1} k(n-k) \Gamma(s) A_k(s, \vec{\xi}) A_{n-k}(s, \vec{\xi}) \right) z^n \\ &= z + \frac{1}{2} \int_{t_0}^t ds \Gamma(s) \left(\sum_{n=2}^{\infty} z^n e^{n\gamma(s,t)} \sum_{k=1}^{n-1} k(n-k) A_k(s, \vec{\xi}) A_{n-k}(s, \vec{\xi}) \right).\end{aligned}\tag{2.5.17}$$

O termo entre parênteses pode ser trabalhado

$$\begin{aligned}\sum_{n=2}^{\infty} z^n e^{n\gamma(s,t)} \sum_{k=1}^{n-1} k(n-k) A_k(t, \vec{\xi}) A_{n-k}(t, \vec{\xi}) &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{n-1} A_k(t, \vec{\xi}) k e^{k\gamma(s,t)} z^k A_{n-k}(t, \vec{\xi}) (n-k) e^{(n-k)\gamma(s,t)} z^{n-k} \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} A_k(t, \vec{\xi}) k e^{k\gamma(s,t)} z^k \sum_{n=1+k}^{\infty} A_{n-k}(t, \vec{\xi}) (n-k) e^{(n-k)\gamma(s,t)} z^{n-k} \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} A_k(t, \vec{\xi}) k e^{k\gamma(s,t)} z^k \sum_{n=k}^{\infty} A_{n-k}(t, \vec{\xi}) (n-k) e^{(n-k)\gamma(s,t)} z^{n-k} \\ &= \left(\sum_{n=1}^{\infty} A_n(t, \vec{\xi}) n e^{n\gamma(s,t)} z^n \right)^2,\end{aligned}\tag{2.5.18}$$

onde, na última linha de (2.5.14) foi usado, simplesmente, o fato de k e $n-k$ serem índices mudos. Portanto

$$\Phi(t, z) = z + \frac{1}{2} \int_{t_0}^t ds \Gamma(s) \left(\sum_{n=1}^{\infty} A_n(s, \vec{\xi}) n e^{n\gamma(s,t)} z^n \right)^2.\tag{2.5.19}$$

Além disso

$$\left(\sum_{n=1}^{\infty} A_n(t, \vec{\xi}) n e^{n\gamma(s,t)} z^n \right)^2 = \left(z \frac{\partial}{\partial z} \sum_{n=1}^{\infty} A_n(t, \vec{\xi}) e^{n\gamma(s,t)} z^n \right)^2 = \left(z \frac{\partial}{\partial z} \Phi(t, z e^{\gamma(s,t)}) \right)^2,\tag{2.5.20}$$

e assim

$$\Phi(t, z) = z + \frac{1}{2} \int_{t_0}^t ds \Gamma(s) \left(z \frac{\partial}{\partial z} \Phi(s, z e^{\gamma(s,t)}) \right)^2.\tag{2.5.21}$$

Note que, em (2.5.20), englobamos o termo $z^n e^{n\gamma(s,t)} = (z e^{\gamma(s,t)})^n$ à varável z , de forma que a função Φ fica avaliada não mais em z mas sim em $z e^{\gamma(s,t)}$. A equação (2.5.21) é uma equação integro-diferencial para

$\Phi(t, z)$. Entretanto, como explicado anteriormente, nosso objetivo é desenvolver uma equação diferencial para $\Phi(t, z)$. Isso pode ser alcançado desenvolvendo as derivadas dessa função

$$\frac{\partial}{\partial t}\Phi(t, z) = \frac{1}{2}\Gamma(t)\left(z\frac{\partial}{\partial z}\Phi(t, z)\right)^2 + \int_{t_0}^t ds\Gamma(s)\left(z\frac{\partial}{\partial z}\Phi(s, ze^{\gamma(s,t)})\right)\frac{\partial}{\partial t}\left(z\frac{\partial}{\partial z}\Phi(s, ze^{\gamma(s,t)})\right). \quad (2.5.22)$$

A derivada em t de (2.5.22) pode ser calculada explicitamente

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(z\frac{\partial}{\partial z}\Phi(s, ze^{\gamma(s,t)})\right) = \frac{\partial}{\partial t}\left(\sum_{n=1}^{\infty} A_n(t, \vec{\xi})nz^n e^{n\gamma(s,t)}\right) = \sum_{n=1}^{\infty} n^2 \dot{B}(t)A_n(t, \vec{\xi})z^n e^{n\gamma(s,t)}. \quad (2.5.23)$$

Agora, perceba que

$$\frac{\partial}{\partial z}\left(z\frac{\partial}{\partial z}\Phi(s, ze^{\gamma(s,t)})\right) = \frac{\partial}{\partial z}\left(\sum_{n=1}^{\infty} A_n(t, \vec{\xi})nz^n e^{n\gamma(s,t)}\right) = \sum_{n=1}^{\infty} n^2 A_n(t, \vec{\xi})z^{n-1} e^{n\gamma(s,t)}, \quad (2.5.24)$$

ou seja, podemos unir as equações (2.5.23) e (2.5.24), de forma a obter

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(z\frac{\partial}{\partial z}\Phi(t, ze^{\gamma(s,t)})\right) = z\dot{B}(t)\frac{\partial}{\partial z}\left(z\frac{\partial}{\partial z}\Phi(s, ze^{\gamma(s,t)})\right). \quad (2.5.25)$$

Portanto, substituindo (2.5.25) em (2.5.22)

$$\frac{\partial}{\partial t}\Phi(t, z) = \frac{1}{2}\Gamma(t)\left(z\frac{\partial}{\partial z}\Phi(t, z)\right)^2 + \dot{B}(t)\int_{t_0}^t ds\Gamma(s)z\left(z\frac{\partial}{\partial z}\Phi(s, ze^{\gamma(s,t)})\right)\frac{\partial}{\partial z}\left(z\frac{\partial}{\partial z}\Phi(s, ze^{\gamma(s,t)})\right). \quad (2.5.26)$$

Gostaríamos de poder eliminar a integral em (2.5.26). Isso de fato pode ser feito avaliando a derivada de (2.5.21) com respeito à z e multiplicando toda a equação resultante por z

$$z\frac{\partial}{\partial z}\Phi(t, z) = z + \int_{t_0}^t ds\Gamma(s)z\left(z\frac{\partial}{\partial z}\Phi(t, ze^{\gamma(s,t)})\right)\frac{\partial}{\partial z}\left(z\frac{\partial}{\partial z}\Phi(s, ze^{\gamma(s,t)})\right). \quad (2.5.27)$$

Agora, as integrais em (2.5.26) e (2.5.27) são idênticas, de forma que podemos elimina-la

$$\frac{\partial}{\partial t}\Phi(t, z) = \frac{1}{2}\Gamma(t)\left(z\frac{\partial}{\partial z}\Phi(t, z)\right)^2 + \dot{B}(t)\left(z\frac{\partial}{\partial z}\Phi(t, z) - z\right), \quad (2.5.28)$$

e lembrando que $\Phi(t_0, z) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n(t_0, \vec{\xi})z^n$ e que, uma vez que para todo $n \geq 2$ vale $A_n(t_0, \vec{\xi}) \equiv 0^6$, concluímos que (2.5.24) é uma equação diferencial parcial para $\Phi(t, z)$ com condição inicial $\Phi(t_0, z) = z$.

⁶Isso ocorre pois cada $a_n(t, \vec{\xi})$ é definido em termo das funções de Ursell $\psi_n^c(t, \vec{\xi})$, essas definidas em termos dos potenciais $\mathcal{V}(t, \xi, \xi')$, que se anulam em $t = t_0$, como definido na seção 2.3. As funções de Ursell, portanto, são nulas em $t = t_0$.

A equação (2.5.28) possui as propriedades que mencionamos no começo desta seção: é uma equação diferencial para um majorante da pressão do sistema. Existe um pequeno incômodo, contudo, ao se trabalhar com (2.5.28): o termo quadrático contendo uma derivada torna essa equação um pouco complexa. Uma saída interessante seria considerar então não a função $\Phi(t, z)$ mas sim sua derivada em z , que denotaremos por $\theta(t, z) \doteq \frac{\partial}{\partial z}\Phi(t, z)$. Ao adotar esse procedimento, podemos imaginar que isso geraria alguma inconsistência já que a função $\Phi(t, z)$ tem relação com a pressão do sistema, enquanto que sua derivada, a princípio, não tem relação aparente. Essa questão é facilmente resolvida quando observamos que a derivada da pressão também tem um significado físico: é proporcional à densidade do sistema. Dessa forma, podemos resumir essa discussão em símbolos

$$\beta p_\Lambda(\beta, z) \leq \Phi(t, z) \Rightarrow \beta \rho_\Lambda(\beta, z) \leq \frac{\partial}{\partial z}\Phi(t, z). \quad (2.5.29)$$

A equação diferencial para $\theta(t, z)$ é dada então por

$$\frac{\partial}{\partial t}\theta(t, z) = \Gamma(t)(z\theta^2(t, z) + z^2\theta(t, z)\frac{\partial}{\partial z}\theta(t, z)) + \dot{B}(t)(\theta(t, z) + z\frac{\partial}{\partial z}\theta(t, z) - 1), \quad (2.5.30)$$

com condição inicial $\theta(t_0, z) = 1$. Cabe aqui mencionar que também não perdemos informação ao passar da representação $\Phi(t, z)$ para a representação $\theta(t, z)$ no que diz respeito ao raio de convergência das séries em questão. O seguinte lema nos mostra isso:

Lema 2.5.1. *Os raios de convergência das séries de Mayer para pressão $p_\Lambda(\beta, z)$ e da série da densidade $\rho_\Lambda(\beta, z)$ são iguais.*

Demonstração. Note que a série de potências da densidade pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \rho_\Lambda(\beta, z) &= z \frac{\partial}{\partial z} p_\Lambda(\beta, z) = z \frac{\partial}{\partial z} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{b_{\Lambda, n} z^n}{n!} \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n b_{\Lambda, n} z^{n-1}}{n!}. \end{aligned}$$

Além disso, a série para a densidade difere da série para a pressão por um fator n multiplicando o coeficiente $b_{\Lambda, n}$. Agora, o raio de convergência R_Λ é dado por (2.5.26). Lembrando que $\lim_{n \rightarrow \infty} n^{\frac{1}{n}} = 1$ obtemos

$$\frac{1}{R_\Lambda} = \lim_{n \rightarrow \infty} (n b_{\Lambda, n})^{\frac{1}{n}} = \lim_{n \rightarrow \infty} n^{\frac{1}{n}} b_{\Lambda, n}^{\frac{1}{n}} = b_{\Lambda, n}^{\frac{1}{n}}.$$

A relação acima é a mesma dada por (1.3.26) e, portanto, o lema está demonstrado. □

Antes de encerrarmos esse capítulo, vamos determinar uma solução particular e bastante importante da equação (2.5.30) associada a potenciais não-negativos, isto é, potenciais que satisfazem (2.5.3) com $\dot{B} \equiv 0$.

2.5.1 Equação Majorante e Potenciais Não-Negativos

Se $\dot{B} \equiv 0$, a equação (2.5.30) se reduz à seguinte equação

$$\frac{\partial}{\partial t}\theta(t, z) = \Gamma(t)(z\theta(t, z)^2 + z^2\theta(t, z)\frac{\partial}{\partial z}\theta(t, z)) \quad \text{com} \quad \theta(t_0, z) = 1. \quad (2.5.31)$$

Supondo $\Gamma(t)$ integrável no intervalo $[t_0, t]$, é conveniente, neste momento, definir o seguinte objeto

$$\tau \doteq \int_{t_0}^t \Gamma(s)ds, \quad (2.5.32)$$

de forma que valem as seguintes relações

$$\frac{d\tau}{dt} = \Gamma(t) \quad ; \quad \frac{dt}{d\tau} = \frac{1}{\Gamma(t)} \quad (2.5.33)$$

(2.5.33) é obtido simplesmente aplicando-se o teorema fundamental do cálculo e a derivação de funções inversas. Agora, se parametrizamos t e z sobre uma curva característica de parâmetro τ , escrevemos $\theta(t(\tau), z(\tau)) = U(\tau)$. Uma vez que θ é diferenciável em t e z , uma simples aplicação da regra da cadeia nos leva à relação⁷

$$\frac{d}{d\tau}U(\tau) = \theta_t \frac{dt}{d\tau} + \theta_z \frac{dz}{d\tau} \quad (2.5.34)$$

Além disso, note que

$$\frac{1}{\Gamma(t)}\theta_t = \frac{dt}{d\tau}\theta_t = \theta_\tau. \quad (2.5.35)$$

Basta então dividir a equação (2.5.31) por $\Gamma(t)$ e utilizar a relação (2.5.35) acima para concluir

$$\theta_t \frac{dt}{d\tau} = \theta_\tau = zU^2(\tau) + z^2U(\tau)\theta_z(\tau). \quad (2.5.36)$$

⁷De agora em diante, funções carregando uma variável como subíndice significarão derivada parcial com respeito àquela variável.

Agora, basta identificar os termos de (2.5.34) e (2.5.36) para encontrar o seguinte par de equações diferenciais

$$\frac{dU}{d\tau}(\tau) = zU^2(\tau) \quad ; \quad \frac{dz}{d\tau} = -z^2U(\tau), \quad (2.5.37)$$

com condições iniciais dadas por $U(0) = 1$ e $z(0) = z_0$. Se escrevermos $U(\tau) = V(z(\tau))$, podemos escrever

$$\frac{dU}{d\tau} = \frac{dV}{dz} \cdot \frac{dz}{d\tau} \Rightarrow \frac{dV}{dz} = \frac{\frac{dU}{d\tau}}{\frac{dz}{d\tau}}, \quad (2.5.38)$$

onde, uma vez que z é dada por uma exponencial, sua derivada é sempre não nula, de forma que (2.5.38) está bem definida. Substituindo as identidades (2.5.37) em (2.5.38) e utilizando a representação em V , obtemos

$$\frac{dV}{dz} = -\frac{V(z)}{z} \Rightarrow V(z) = \frac{z_0}{z}. \quad (2.5.39)$$

Assim, podemos escrever $U(\tau) = z_0/z(\tau)$ e substituir essa identidade na segunda igualdade de (2.5.37). Obtemos assim

$$\frac{dz}{d\tau} = -zz_0 \Rightarrow z = z_0 e^{-z_0 \tau}. \quad (2.5.40)$$

Multiplicar ambos os lados da equação à direita de (2.5.40) por $-\tau$ nos leva à seguinte conclusão

$$\begin{aligned} -z\tau &= -z_0\tau e^{-z_0\tau} \iff z_0\tau = W(z\tau) \\ \therefore z_0 &= -\frac{1}{\tau}W(-z\tau), \end{aligned} \quad (2.5.41)$$

onde a função $W = W(x)$ utilizada acima é a chamada função W de Lambert⁸. Substituindo (2.5.41) em (2.5.39) e lembrando que τ é função explícita de t , recuperamos a solução $\theta = \theta(t, z)$ procurada

$$\theta(t, z) = -\frac{1}{z\tau}W(-z\tau). \quad (2.5.42)$$

A relação (2.5.42) vale dentro do domínio de analiticidade da função W de Lambert (c.f.(E.8)), que neste caso é dado por

$$ez\tau = ez \int_{t_0}^t \Gamma(s)ds < 1. \quad (2.5.43)$$

⁸Ver apêndice E.

Portanto, por conta de (2.5.29), teremos que a pressão $p_\Lambda(\beta, z)$ deste sistema fica majorada por (2.5.42) dado que

$$|z| < \left(e \int_{t_0}^t \Gamma(s) \right)^{-1},$$

sendo analítica nesse domínio. Note que, no caso de potenciais não-negativos temos uma solução explícita para o majorante da pressão. Para isto, basta aplicar o teorema fundamental do cálculo e utilizar as relações (E.6) e (E.7) do apêndice E

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\tau} \frac{\partial}{\partial z} \int_t^{-z\tau} \frac{W(z')}{z'} dz' &= -\frac{1}{\tau} \frac{W(-z\tau)}{z\tau} = \theta(t, z) \\ \Rightarrow \Phi(t, z) &= -\frac{1}{\tau} \int_t^{-z\tau} \frac{W(z')}{z'} dz' = W(-z\tau) + \frac{1}{2} W^2(-z\tau). \end{aligned} \quad (2.5.44)$$

Os resultados desta seção encontram-se discutidos em [23]. Antes de prosseguirmos, vamos fazer uma pequena observação que nos será bastante útil no futuro, com base na discussão contida em [26]. Retomemos a representação (2.5.16) do majorante Φ em série de potências. Lembrando que $\theta(t, z) = \frac{\partial}{\partial z} \Phi(t, z)$, podemos escrever $\theta(t, z)$ também como série de potências, a saber

$$\theta(t, z) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n(t) z^{n-1} \quad \text{onde} \quad C_n = nA_n. \quad (2.5.45)$$

Essa representação mostra que a diferenciabilidade de $\theta(t, z)$ está relacionada com a diferenciabilidade dos coeficientes $C_n(t)$; assim, podemos encontrar uma equação diferencial para os coeficientes $C_n(t)$ substituindo (2.5.45) em (2.5.30). Veja que

$$\begin{aligned} (z\theta(t, z))^2 &= \left[\sum_{n=1}^{\infty} C_n(t) z^n \right]^2 = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} C_n(t) C_j(t) z^{n+j} \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{n-1} C_{n-j}(t) C_j(t) z^n = \sum_{n=2}^{\infty} \sum_{j=1}^{n-1} C_{n-j}(t) C_j(t) z^n, \end{aligned} \quad (2.5.46)$$

e além disso, o termo que multiplica $\Gamma(t)$ em (2.5.30) pode ser escrito como $z\theta^2(t, z) + z^2\theta(t, z)\theta_z(t, z) = \frac{1}{2} \frac{d}{dz} (z\theta(t, z))^2$. Com essas identidades, a substituição de (2.5.45) em (2.5.30) nos levará ao seguinte sistema

de equações diferenciais ordinárias

$$\dot{C}_n(t) = n\dot{B}C_n(t) + \frac{n\Gamma(t)}{2} \sum_{j=1}^{n-1} C_j(t)C_{n-j}(t) \quad (n \geq 2), \quad (2.5.47)$$

onde $\dot{C}_n(t)$ representa a derivada de $C_n(t)$ com respeito à t . As condições iniciais de (2.5.47) são $C_n(t_0) = 0 \forall n \geq 2$ e $C_1(t) \equiv 1 \forall t \in [t_0, t]$. A equação equivalente ao potencial não-negativo abordado nesta seção será então

$$\dot{C}_n(t) = \frac{n\Gamma(t)}{2} \sum_{j=1}^{n-1} C_j(t)C_{n-j}(t). \quad (2.5.48)$$

Como vimos, a solução da equação (2.5.30) é dada por (2.5.42). Dentro do domínio de analiticidade dado por (2.5.43), a equação (2.5.42) possui a seguinte expansão em série de potências⁹

$$\theta(t, z) = -\frac{1}{z\tau}W(-z\tau) = \frac{1}{z\tau} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n^{n-1}}{n!}(\tau z)^n. \quad (2.5.49)$$

Portanto, nossa última análise nos leva naturalmente à seguinte proposição:

Proposição 2.5.1. *Se $C_1(t) \equiv 1 \forall t \in [t_0, t]$ então para cada $n \geq 1$, os coeficientes $C_n(t) = \frac{(n\tau)^{n-1}}{n!}$ são soluções da equação (2.5.48) dentro do raio de convergência obtido por (2.5.43) com condição inicial $C_n(t_0) = 0 \forall n \geq 2$.*

Voltaremos à Proposição 2.5.1 em um momento oportuno.

⁹Ver apêndice E.

Capítulo 3

Equação Majorante e o Gás de Yukawa

3.1 A conjectura de Gallavotti, Benfatto e Nicoló

Estabelecer a convergência da série de Mayer (1.3.24) para o gás de Yukawa (2.3.1) não é tarefa simples: existem intervalos de temperatura recíproca β nos quais haverá divergências associadas a alguns dos coeficientes de Mayer $b_{\Lambda,n}$ expressos por (1.3.25), intervalos esses que recebem o nome de *thresholds*. Mostraremos aqui uma forma (heurística) de se constatar essas divergências conforme discussão feita em [3]. Para isso, considere um sistema termodinâmico bidimensional composto por $2n$ partículas interagindo via potencial de Yukawa e assuma que esse sistema possua uma configuração neutra, isto é, $\sum_{j=1}^{2n} \sigma_j = 0$. Note que isso é possível, uma vez que existe um número par de constituintes nesse sistema. Vamos analisar, para esta situação específica, a seguinte integral

$$\int_{X^{2n}} d^2x_1 \cdots d^2x_{2n} e^{-\beta \sum_{1 \leq i < j \leq 2n} \sigma_i \sigma_j v(x_i - x_j)}. \quad (3.1.1)$$

A integral acima representa uma integral associada ao termo $2n$ -ésimo da função de partição (1.2.4) calculada sobre uma configuração neutra particular. Para calcular essa integral, vamos fazer algumas aproximações. Primeiramente, fixemos a posição de uma das partículas, digamos, a partícula com vetor configuração ξ_1 e consideremos que todas as $2n - 1$ partículas restantes estão próximas à ξ_1 ; de fato, suponha que o sistema esteja confinado em uma região tão pequena do plano, que podemos considerar a distância *entre qualquer par de partículas* como sendo aproximadamente igual e denotado por $\mathcal{L}_N$. A intenção ao se fazer essa aproximação é considerar apenas o termo dominante da integral (3.1.1) já que,

quando distantes, as partículas praticamente não interagem entre si, uma vez que o potencial de Yukawa decai exponencialmente à longas distâncias. No regime de curtas distâncias, o potencial de Yukawa pode ser aproximado¹

$$\beta v(x_i - x_j) \approx \frac{\beta}{2\pi} \sigma_i \sigma_j \ln \mathcal{L}_N^{-1}, \quad \text{onde } \sigma_i, \sigma_j = \pm 1, i \neq j. \quad (3.1.2)$$

Note que, ao substituir a aproximação (3.1.2) em (3.1.1), teremos um produto de exponenciais que se dividem em dois grupos, dependendo do sinal do produto $\sigma_i \sigma_j = \pm 1$. Para agrupar essas integrais, precisamos saber quantas interações dentre as $2n$ partículas se dão entre cargas iguais e quantas se dão entre cargas opostas. É fácil ver que, dado que existem n cargas positivas e n cargas negativas, haverá um total de n^2 interações entre partículas de sinais opostos. Além disso, há $n(n-1)$ interações entre partículas de mesma carga. Perceba que, uma vez fixada a posição da partícula ξ_1 , a integral (3.1.1) perde um grau de liberdade. Essa discussão nos leva então à concluir que (3.1.1) se reduz à integral

$$\begin{aligned} \int_{X^{2n-1}} d^2 x_2 \cdots d^2 x_{2n} \left(e^{\frac{\beta}{2\pi} \ln \mathcal{L}_N^{-1}} \right)^{n^2} \left(e^{-\frac{\beta}{2\pi} \ln \mathcal{L}_N^{-1}} \right)^{n(n-1)} &= (\mathcal{L}_N^{-1})^{-n^2 \frac{\beta}{2\pi}} (\mathcal{L}_N^{-1})^{n(n-1) \frac{\beta}{2\pi}} \int_{X^{2n-1}} d^2 x_2 \cdots d^2 x_{2n} \\ &= (\mathcal{L}_N^{-1})^{-n^2 \frac{\beta}{2\pi}} (\mathcal{L}_N^{-1})^{n(n-1) \frac{\beta}{2\pi}} (\mathcal{L}_N)^{2(2n-1)}. \end{aligned} \quad (3.1.3)$$

Para que esse sistema não colapse, devemos ser capazes de tomar $\mathcal{L}_N$ tão pequeno quanto se queira sem que isso produza qualquer divergência na integral (3.1.3). Fisicamente, podemos pensar que o não colapso desse sistema deve representar uma forma de equilíbrio entre os pares, proveniente de um balanço energético entre as interações via potencial e a entropia² do sistema, de forma que não haja atração suficiente para que duas partículas de sinais opostos coexistam no mesmo ponto do plano. Portanto, uma condição necessária para que não haja colapso é que, ao tomar o limite $\mathcal{L}_N \rightarrow 0$, (3.1.3) seja finito, fato que ocorrerá dado que a soma dos expoentes da última linha de (3.1.3) seja não-negativa, ou seja

$$-n^2 \frac{\beta}{2\pi} + n(n-1) \frac{\beta}{2\pi} + 2(2n-1) \geq 0 \Rightarrow \beta \leq \beta_{2n} \doteq \frac{8\pi(2n-1)}{2n}. \quad (3.1.4)$$

A condição acima depende da temperatura justamente por conta do balanço energético depender da energia térmica. Então, como argumentam Gallavotti, Nicoló e Benfatto em [3], se $\beta \in (\frac{8\pi(2n-1)}{2n}, \frac{8\pi(2n+1)}{2n+1})$, haverá

¹Ver apêndice C.

²A entropia, neste contexto, é simplesmente o valor da integral $\int_{X^{2n-1}} d^2 x_2 \cdots d^2 x_{2n}$.

divergência do coeficiente de Mayer de ordem $2n$ devido ao colapso de um multipolo $2n$ neutro. Alguns comentários se fazem necessário neste momento:

1. Os próprios autores afirmam, em [3], que a argumentação apresentada acima é "qualitativa"; de fato, uma argumentação mais consistente deveria ser obtida analisando-se explicitamente os coeficientes de Mayer $b_{\Lambda,2n}$ associados aos multipolos neutros. Parece, entretanto, não haver resultados a respeito desse colapso partindo-se de uma análise direta desses coeficientes. A existência dos thresholds e seus valores explicitados em (3.1.4) parecem ser senso comum, como podemos ver em [15], [14], [2] entre outros.
2. Além da existência dos thresholds obtidos acima, os autores afirmam em [3] que a temperatura recíproca β_{2n} , a simples retirada dos termos pares de ordem $\leq 2n$ da série de Mayer do gás de Yukawa torna o restante da série finito. Essa afirmação é tomada como um problema em aberto em [2]. Por conta disso, nos referiremos a ela como *conjectura de Benfatto, Gallavotti e Nicoló*, ou simplesmente conjectura BGN.
3. Se $n = 1$ devemos ter o colapso do termo $b_{\Lambda,2}$ associado a um único dipolo se $\beta \in (4\pi, 6\pi)$. Portanto, se $\beta < 4\pi$ não esperamos encontrar divergência nos coeficientes $b_{\Lambda,n}$ da série de Mayer.
4. As divergências dos coeficientes $b_{\Lambda,2n}$ são interpretadas como o colapso de cargas de sinais opostas em clusters neutros que, ao se aproximarem indefinidamente, acabam por gerar essas divergências devido à não-regularidade na origem do potencial de Yukawa bidimensional.

3.2 Primeiros Resultados - A série de Mayer para $\beta < 4\pi$

Os coeficientes $C_n(t)$ da série de potências (2.5.45) satisfazem (2.5.47) com $\dot{B}(t)$ e $\Gamma(t)$ dados por (2.3.11) quando aplicamos os resultados do capítulo anterior para o gás de Yukawa (2.3.8) regularizado, onde $t \in [t_0, 0]$ e t_0 fixado e finito. Fixado $k \in \mathbb{N}$, defina o seguinte objeto

$$f_k(t) \doteq \exp \left(\frac{k+1}{k} \int_{t_0}^t B(s') ds' \right). \quad (3.2.1)$$

Agora, considere a seguinte mudança de variáveis: se $zf_k(t) \doteq \omega$, podemos escrever o majorante da densidade $\theta(t, z)$ em termos de ω . Denotamos então $\psi^{(k)}(t, \omega) = \theta(t, \frac{\omega}{f_k(t)})$. Precisamos saber como se altera a equação (2.5.30) dada a mudança prescrita. Para isso, realizamos as operações abaixo

$$\begin{aligned}\psi_t^{(k)} &= \theta_t(t, z) - \theta_z(t, z) \frac{df_k(t)}{dt} \frac{1}{f_k^2(t)} \omega = \theta_t(t, z) - z\theta_z(t, z) \frac{df_k(t)}{dt} \frac{1}{f_k(t)}, \\ \psi_\omega^{(k)}(t, \omega) &= \theta_z(t, z) \frac{1}{f_k(t)} \Rightarrow z\theta_z(t, z) = \omega\psi_\omega^{(k)}(t, \omega).\end{aligned}\tag{3.2.2}$$

Unindo ambas as relações em (3.2.2), concluimos que

$$\theta_t(t, z) = \psi_t^{(k)}(t, \omega) + \frac{df_k(t)}{dt} \frac{1}{f_k(t)} \omega\psi_\omega^{(k)}(t, \omega).\tag{3.2.3}$$

Além disso, temos

$$\begin{aligned}z^2\theta(t, z)\theta_z(t, z) &= z\theta(t, z)z\theta_z(t, z) = \frac{\omega^2}{f_k(t)}\psi^{(k)}(t, \omega)\psi_\omega^{(k)}(t, \omega), \\ z\theta^2(t, z) &= \frac{\omega}{f_k(t)}(\psi^{(k)}(t, \omega))^2.\end{aligned}\tag{3.2.4}$$

Substituindo as relações (3.2.3) e (3.2.4) em (2.5.30), organizando os termos adequadamente definindo

$$\Gamma_k(t) \doteq \frac{\Gamma(t)}{f_k(t)},\tag{3.2.5}$$

obtemos a relação encontrada em [23]

$$\begin{aligned}\psi_t^{(k)} - \Gamma_k(t)\omega^2\psi^{(k)}(t, \omega)\psi_\omega^{(k)}(t, \omega) &= \left(\dot{B}(t) - \frac{1}{f_k(t)} \frac{df_k(t)}{dt}\right) \omega\psi_\omega^{(k)}(t, \omega) + \dot{B}(t)\psi^{(k)}(t, \omega) - \dot{B}(t) + \\ &\quad + \Gamma_k(t)\omega(\psi^{(k)}(t, \omega))^2.\end{aligned}\tag{3.2.6}$$

A equação diferencial (3.2.6) é mais esclarecedora quando colocada como uma equação diferencial dos (novos) coeficientes de $\psi^{(k)}(t, \omega)$, de forma análoga à obtida em (2.5.47). Para isso, escrevemos $\psi^{(k)}(t, \omega)$ como série de potências de ω

$$\psi^{(k)}(t, \omega) = 1 + \sum_{n=2}^{\infty} C_n^{(k)}(t)\omega^{n-1}.\tag{3.2.7}$$

Aplicamos então o mesmo raciocínio utilizado em (2.5.47) para escrever as seguintes relações

$$\begin{aligned}\psi_t^{(k)} &= \sum_{n=2}^{\infty} \frac{dC_n^{(k)}(t)}{dt} \omega^{n-1}, \\ \omega^2(\psi^{(k)}(t, \omega))^2 &= \sum_{n=2}^{\infty} \sum_{j=1}^{n-1} C_j^{(k)}(t) C_{n-j}^{(k)}(t) \omega^{n-1}, \\ \psi_{\omega}^{(k)}(t, \omega) &= \sum_{n=2}^{\infty} (n-1) C_n^{(k)}(t) \omega^{n-2}.\end{aligned}\tag{3.2.8}$$

Concluimos que (3.2.6) equivale à seguinte equação diferencial para os coeficientes $C_n^{(k)}(t)$

$$\dot{C}_n^{(k)}(t) = -\left(\frac{n-k-1}{k}\right) \dot{B}(t) C_n^{(k)}(t) + \frac{n\Gamma_k(t)}{2} \sum_{j=1}^{n-1} C_j^{(k)} C_{n-j}^{(k)}(t),\tag{3.2.9}$$

com condições iniciais $C_1^{(k)}(t) \equiv 1 \ \forall t \in [t_0, 0]$ e $C_n^{(k)}(t_0) = 1$ para todo $n \geq 2$. Note que a relação (3.2.9) contém um parâmetro k proveniente da definição (3.2.1). Esse parâmetro, embora fixado desde o início de nossa análise, pode ser escolhido com certa arbitrariedade. Como consequência, a escolha de k refletirá diretamente na equação diferencial (3.2.9). Nosso primeiro resultado diz respeito à escolha particular $k = 1$; nesse caso, o termo $n - k - 1 = n - 2$ presente entre parênteses na equação acima será não-negativa para todo $n \geq 2$. Então, para todo $n \geq 2$, uma vez que (3.2.7) é um majorante com coeficientes todos positivos, vale a desigualdade

$$\dot{C}_n^{(1)}(t) = -(n-2) \dot{B}(t) C_n^{(1)}(t) + \frac{n\Gamma_1(t)}{2} \sum_{j=1}^{n-1} C_j^{(1)}(t) C_{n-j}^{(1)}(t) \leq \frac{n\Gamma_1(t)}{2} \sum_{j=1}^{n-1} C_j^{(1)}(t) C_{n-j}^{(1)}(t).\tag{3.2.10}$$

Por conta da última desigualdade, seja $\tilde{C}_n^{(1)}$ a solução de (3.2.10) com igualdade estrita, isto é

$$\dot{\tilde{C}}_n^{(1)}(t) = \frac{n\Gamma_1(t)}{2} \sum_{j=1}^{n-1} \tilde{C}_j^{(1)}(t) \tilde{C}_{n-j}^{(1)}(t),\tag{3.2.11}$$

onde $\tilde{C}_1^{(1)}(t) \equiv 1$ e $\tilde{C}_n^{(1)}(t_0) = 1$ para todo $n \geq 2$. Então, conclui-se que

$$C_n^{(1)}(t) \leq \tilde{C}_n^{(1)}(t) \quad \forall n \geq 2,\tag{3.2.12}$$

dado que t pertença à um intervalo comum onde ambas as soluções $C_n^{(1)}(t)$ e $\tilde{C}_n^{(1)}(t)$ estejam bem definidas. Ora, mas a equação (3.2.11) é exatamente igual à equação (2.5.48) dado que $\Gamma(t)$ seja substituído por $\Gamma_1(t)$. Isso implica, por conta de (2.5.45), (2.5.49) e da Proposição 2.5.1 que $\tilde{C}_n^{(1)}(t)$ são dados por

$$\tilde{C}_n^{(1)}(t) = \frac{(n\tau_1)^{n-1}}{n!} \quad \text{onde} \quad \tau_1 \doteq \int_{t_0}^t \Gamma_1(s)ds = \int_{t_0}^t \Gamma(s) \exp\left(-2 \int_{t_0}^s B(s')ds'\right)ds, \quad (3.2.13)$$

e são finitos e bem definidos se $\tau_1 < +\infty$ por conta de (2.5.43). Nesse regime, então, vale a desigualdade (3.2.12). Veja que, embora a majoração (3.2.12) não inclua os coeficientes com $n = 1$, vale por hipótese que $C_1^{(1)}(t) = \tilde{C}_1^{(1)}(t) = 1$ para todo $t \in [t_0, t]$. Portanto, (3.2.12) acaba por valer para todos os coeficientes de ambas as séries, dado que o regime de analiticidade da série (3.2.11) seja obedecido. É fácil ver que as integrais presentes no termo τ_1 acima são sempre finitas no intervalo compacto $[t_0, t]$, de forma que a desigualdade (3.2.12) vale, em última análise, para todo t nesse intervalo.

A desigualdade (3.2.12) diz respeito aos coeficientes $C_n^{(1)}(t)$ e $\tilde{C}_n^{(1)}(t)$, que por sua vez são coeficientes de uma série de potências de ω . Entretanto, nosso problema inicial diz respeito à uma série de potências em z . Precisamos, então, saber fazer a ligação entre a informação presente em (3.2.12) e nossa teoria inicial. Voltando às relações (2.5.14), (2.5.18) e (2.5.29), vemos que são válidas as desigualdades

$$\frac{1}{n!}a_n(t, \vec{\xi}) \leq A_n(t, \vec{\xi}) \Rightarrow \frac{1}{(n-1)!}a_n(t, \vec{\xi}) \leq nA_n(t, \vec{\xi}) \equiv C_n(t). \quad (3.2.14)$$

De fato, as relações presentes em (3.2.14) já estavam presentes (implicitamente) em nossa teoria, mas não haviam sido explicitadas até o presente momento. Agora, entretanto, elas serão de particular importância. Note que, por construção, $C_n = f_k^{n-1}(t)C_n^{(k)}$ para todo $k \in \mathbb{N}$ fixado, de forma que podemos escrever (3.2.14) de forma alternativa

$$\frac{1}{(n-1)!}a_n(t, \vec{\xi}) \leq f_k^{n-1}(t)C_n^{(k)}(t) \quad n \in \mathbb{N}. \quad (3.2.15)$$

Para o caso particular $k = 1$ estudado acima, ainda podemos incluir em (2.2.15) a informação extra trazida por (3.2.12)

$$\frac{1}{(n-1)!}a_n(t, \vec{\xi}) \leq f_1^{n-1}(t)C_n^{(1)}(t) \leq f_1^{n-1}(t)\tilde{C}_n^{(1)}(t) \quad n \geq 2, \quad (3.2.16)$$

e como $f_1(t)$ é uma exponencial bem-comportada, nossa última análise nos leva a concluir que a desigualdade (3.2.16) também é válida para todo t no intervalo compacto $[t_0, t]$. Perceba que a desigualdade

(3.2.15), bem como a desigualdade (3.2.16), dizem respeito à série de potências em z , como gostaríamos que fosse.

Como $\tilde{C}_n^{(1)}(t)$ é dado por (3.2.13), podemos definir $\tilde{C}_n$

$$\tilde{C}_n(t) \doteq f_1^{n-1}(t)\tilde{C}_n^{(1)}(t) = \frac{n^{n-1}}{n!}(\tau_1 f_1(t))^{n-1}. \quad (3.2.17)$$

Além disso, verificamos a identidade

$$\begin{aligned} \frac{n^{n-1}}{n!}(\tau_1 f_1(t))^{n-1} &= \frac{n^{n-1}}{n!} \left[e^{2 \int_{t_0}^t B(s') ds'} \int_{t_0}^t \Gamma(s) e^{-2 \int_{t_0}^s B(s') ds'} ds \right]^{n-1} \\ &= \frac{n^{n-1}}{n!} \left[\int_{t_0}^t \Gamma(s) e^{2 \int_s^t B(s') ds'} ds \right]^{n-1} = \frac{(n\tau)^{n-1}}{n!}, \end{aligned} \quad (3.2.18)$$

onde

$$\tau \doteq \int_{t_0}^t \Gamma(s) e^{2 \int_s^t B(s') ds'} ds. \quad (3.2.19)$$

Portanto, os coeficientes $\tilde{C}_n(t)$, agora de uma série de potências em z , majoram $\theta(t, z)$ e, consequentemente $p_\Lambda(\beta, z)$ quando o potencial de Yukawa está regularizado, conforme (3.2.16).

Queremos agora tirar conclusões a respeito da convergência da série de Mayer com interações devido ao potencial de Yukawa original (não regularizado). Isso pode ser feito tomando-se o limite $t_0 \rightarrow -\infty$ e fixando $t = 0$, conforme discussão feita na seção 2.3, e estudando como esse limite altera a desigualdade (3.2.16). Pedir que a desigualdade (3.2.16) se mantenha a fim de que a série de Mayer permaneça majorada após a tomada do limite $t_0 \rightarrow -\infty$, é equivalente à pedir que a série de potências em z com coeficientes $\tilde{C}_n(t)$ seja analítica. Por conta de (3.2.18), vemos que a série de potências cujos coeficientes são dados por $\tilde{C}_n(t)$ é equivalente à série (2.5.49) e garantir sua analiticidade significa satisfazer a condição (2.5.43). Basta então requerer que τ seja finito no limite $t_0 \rightarrow -\infty$ para que essa série seja analítica em um domínio não-nulo, isto é

$$\begin{aligned} \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \int_{t_0}^0 \frac{d\kappa(s)}{ds} \frac{1}{\kappa^2(s)} \exp \left(2 \int_s^0 \frac{\beta}{8\pi} \frac{d}{ds'} (-\ln \kappa(s')) ds' \right) ds &= \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \int_{t_0}^0 -\frac{d\kappa(s)}{ds} \frac{1}{\kappa^2(s)} \kappa^{\frac{\beta}{4\pi}}(s) ds \\ &= \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \frac{4\pi}{4\pi - \beta} \kappa^{\frac{\beta}{4\pi} - 1}(s) \Big|_{t_0}^0 \\ &= \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \frac{4\pi}{4\pi - \beta} (1 - \kappa^{\frac{\beta}{4\pi} - 1}(t_0)) < \infty. \end{aligned} \quad (3.2.20)$$

Como $\lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \kappa(t_0) = \infty$, o limite presente na última linha de (3.2.20) é finito dado que

$$\frac{\beta}{4\pi} - 1 < 0 \Rightarrow \beta < 4\pi, \quad (3.2.21)$$

onde a desigualdade estrita leva em consideração o denominador $4\pi - \beta$ em (3.2.20). Portanto, dado que $\beta < 4\pi$, podemos tomar o limite $t_0 \rightarrow -\infty$, recuperar o potencial de Yukawa original, e concluir que $\tilde{C}_n(t)$ são todos finitos nesse regime. Agora, utilizamos o fato de que, pela conjectura BGN, não há divergências dos coeficientes $b_{\Lambda,n}$ dado que $\beta < 4\pi$, o que indica que todos os coeficientes $a_n(t, \vec{\xi})$ também são finitos. Isso garante que (3.2.16) vale uniformemente, isto é, independente do volume. Portanto, concluimos que se $\beta < 4\pi$ a série de Mayer (1.3.24) converge uniformemente no limite $t_0 \rightarrow -\infty$, o que vai de acordo com a conjectura BGN.

3.3 Divergência de $a_2(t)$

Estudar a convergência da série de Mayer para $\beta > 4\pi$ estará relacionado à estudar a equação (3.2.9) para $k \geq 2$. Neste trabalho, estudaremos o caso particular de $k = 2$. Como veremos na próxima seção, entretanto, se $k \geq 2$ a análise feita na última seção não se generaliza de maneira trivial e precisaremos desenvolver algumas técnicas diferentes para controlar a convergência da série. Precisamos, antes de tudo, constatar que a divergência do termo $b_{\Lambda,2}$ prevista pela conjectura BGN de fato ocorre se $\beta > 4\pi$. Esse é o objetivo desta seção.

Utilizando a notação introduzida no apêndice C, podemos escrever

$$\psi_2^c(t, \xi_1, \xi_2) = \exp \left[-\frac{\beta \sigma_1 \sigma_2}{2\pi} \left(K_0(\sqrt{\kappa(t)}r) - K_0(\sqrt{\kappa(t_0)}r) \right) \right] - 1, \quad (3.3.1)$$

onde $r \doteq |x_1 - x_2|$. Considere agora a relação (2.5.1) para $n = 2$. Podemos escrevê-la de maneira levemente diferente, seguindo o raciocínio a seguir

$$\begin{aligned} a_2(t) &= \sup_{\xi_1} \int d\rho(\xi_2) |\psi_2^c(t, \xi_1, \xi_2)| = \sup_{x_1} \sum_{\sigma_2 \in \{-1,1\}, \sigma_1=1} \int d^2x_2 |\psi_2^c(t, \xi_1, \xi_2)| \\ &= \sup_{x_1} \int d^2x_2 \left| \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2 \in \{-1,1\}} \Pi_+ \psi_2^c(t, \xi_1, \xi_2) \right| + \sup_{x_1} \int d^2x_2 \left| \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2 \in \{-1,1\}} \Pi_- \psi_2^c(t, \xi_1, \xi_2) \right|, \end{aligned} \quad (3.3.2)$$

onde $\Pi_{\pm} \doteq (1 \pm \sigma_1 \sigma_2)/2$. As relações acima nos levam a definir os seguintes objetos

$$a_2^{\pm}(t) \doteq \sup_{x_1} \int d^2 x_2 \frac{1}{2} \left| \sum_{\sigma_1, \sigma_2 \in \{-1, 1\}} \Pi_{\pm} \psi_2^c(t, \xi_1, \xi_2) \right|, \quad (3.3.3)$$

de forma que escrevemos $a_2(t) = a_2^+(t) + a_2^-(t)$. A vantagem de se escrever $a_2(t)$ como em (3.3.3) é que podemos distinguir entre as contribuições de cargas de mesmo sinal e sinais opostos, uma vez que cada um dos projetores $\Pi_{\pm}$ anula uma das duas configurações. Dessa forma, se a divergência do termo $b_{\Lambda, 2}$ está associado ao colapso dos dipolos neutros de $\psi_2^c(t, \xi_1, \xi_2)$ como prevê a conjectura BGN, será o termo $a_2^-(t)$ o responsável pela divergência de $a_2(t)$. Como $K_0(x)$ é uma função monótona decrescente, assim como $\kappa(t)$ e utilizando a desigualdade $1 - e^{-y} \leq y$ se $y \geq 0$, quando o produto $\sigma_1 \sigma_2$ for igual a 1, estimamos

$$\begin{aligned} \left| \psi_2^c(t, x_1, x_2, \sigma_1 \sigma_2 = 1) \right| &= \left| \exp \left[-\frac{\beta}{2\pi} \left(K_0(\sqrt{\kappa(t)}r) - K_0(\sqrt{\kappa(t_0)}r) \right) \right] - 1 \right| \\ &= 1 - \exp \left[-\frac{\beta}{2\pi} \left(K_0(\sqrt{\kappa(t)}r) - K_0(\sqrt{\kappa(t_0)}r) \right) \right] \\ &\leq \frac{\beta}{2\pi} \left(K_0(\sqrt{\kappa(t)}r) - K_0(\sqrt{\kappa(t_0)}r) \right). \end{aligned} \quad (3.3.4)$$

Inserindo (3.3.4) em $a_2^+(t)$ e substituindo a identidade (C.10) na primeira relação de (C.5), concluímos

$$\begin{aligned} a_2^+(t) &\leq \beta \int_0^{\infty} r \left(K_0(\sqrt{\kappa(t)}r) - K_0(\sqrt{\kappa(t_0)}r) \right) dr = \beta \int_0^{\infty} u \left(\frac{1}{\kappa(t)} K_0(u) - \frac{1}{\kappa(t_0)} K_0(u) \right) du \\ &= \beta \left(\frac{1}{\kappa(t)} \int_0^{\infty} u K_0(u) du - \frac{1}{\kappa(t_0)} \int_0^{\infty} u K_0(u) du \right) \\ &= \beta \left(\frac{1}{\kappa(t)} - \frac{1}{\kappa(t_0)} \right). \end{aligned} \quad (3.3.5)$$

No limite $t_0 \rightarrow -\infty$ a relação (3.3.5) é finita, de forma que $a_2^+(t)$ não carrega divergências consigo.

Para o caso $\sigma_1 \sigma_2 = -1$, e utilizando a representação (C.17), temos

$$\dot{v}(s, |x - y|) = -\frac{\beta}{4\pi} \frac{1}{\kappa(s)} \frac{d\kappa(s)}{ds} h(\sqrt{\kappa(s)}|x - y|) \geq 0, \quad (3.3.6)$$

e, juntamente com a primeira linha de (2.4.28), escrevemos

$$|\psi_2^c(t, \xi_1, \xi_2)| = -\frac{\beta}{4\pi} \int_{t_0}^t ds \frac{1}{\kappa(s)} \frac{d\kappa(s)}{ds} h(\sqrt{\kappa(s)}r) e^{-\frac{\beta}{4\pi} \int_s^t \frac{1}{\kappa(\bar{s})} \frac{d\kappa(\bar{s})}{d\bar{s}} h(\sqrt{\kappa(\bar{s})}r) d\bar{s}}. \quad (3.3.7)$$

Então $a_2^-(t)$ se torna

$$a_2^-(t) = -\frac{\beta}{2} \int_0^\infty r dr \int_{t_0}^t ds \frac{1}{\kappa(s)} \frac{d\kappa(s)}{ds} h(\sqrt{\kappa(s)}r) e^{-\frac{\beta}{4\pi} \int_s^t \frac{1}{\kappa(\tilde{s})} \frac{d\kappa(\tilde{s})}{d\tilde{s}} h(\sqrt{\kappa(\tilde{s})}r) d\tilde{s}}. \quad (3.3.8)$$

Utilizamos agora as propriedades de monotonicidade das funções $\kappa(t)$ e $K_0(x)$ de forma que, $\forall r \in \mathbb{R}$, fixados s, t obtemos, para $s \leq \tau \leq t$

$$\kappa(s) \geq \kappa(\tau) \geq \kappa(t) \Rightarrow h(\sqrt{\kappa(s)}r) \leq h(\sqrt{\kappa(\tau)}r) \leq h(\sqrt{\kappa(t)}r). \quad (3.3.9)$$

Portanto, como $t \leq 0$ podemos majorar $h(\sqrt{\kappa(t)}r)$ por 1 na integral da exponencial de (3.3.8). Além disso, note que

$$\begin{aligned} -\frac{\beta}{4\pi} \int_s^t \frac{1}{\kappa(\tilde{s})} \frac{d\kappa(\tilde{s})}{d\tilde{s}} d\tilde{s} &= -\frac{\beta}{4\pi} \int_s^t \frac{d \ln \kappa(s)}{ds} ds \\ &= -\frac{\beta}{4\pi} (\ln \kappa(t) - \ln \kappa(s)) \\ &= \frac{\beta}{4\pi} \ln \frac{\kappa(t)}{\kappa(s)} = \ln \left(\frac{\kappa(t)}{\kappa(s)} \right)^{-\frac{\beta}{4\pi}}, \end{aligned} \quad (3.3.10)$$

o que nos leva então às igualdades

$$\begin{aligned} a_2^-(t) &= -\frac{\beta}{2} \int_0^\infty r dr \int_{t_0}^t ds \frac{1}{\kappa(s)} \frac{d\kappa(s)}{ds} h(\sqrt{\kappa(s)}r) \left(\frac{\kappa(t)}{\kappa(s)} \right)^{-\frac{\beta}{4\pi}} \\ &= -\frac{\beta}{2} \int_0^\infty u h(u) du \int_{t_0}^t ds \frac{1}{\kappa^2(s)} \frac{d\kappa(s)}{ds} \left(\frac{\kappa(s)}{\kappa(t)} \right)^{\frac{\beta}{4\pi}} \\ &= -\frac{\beta}{2} \int_0^\infty u h(u) du \frac{1}{\kappa^{\frac{\beta}{4\pi}}(t)} \int_{t_0}^t \frac{d\kappa(s)}{ds} \kappa^{\frac{\beta}{4\pi}-2}(s) ds. \end{aligned} \quad (3.3.11)$$

Novamente, utilizando a relação (C.5) do apêndice C, concluímos

$$a_2^-(t) \leq \frac{2\pi\beta}{4\pi - \beta} \left[\frac{1}{\kappa(t)} - \frac{1}{\kappa(t_0)} \left(\frac{\kappa(t_0)}{\kappa(t)} \right)^{\frac{\beta}{4\pi}} \right]. \quad (3.3.12)$$

Se $\beta > 4\pi$, o limite $t_0 \rightarrow -\infty$ em (3.3.12) irá gerar divergência devido ao termo $\kappa(t_0)$ que cresce infinitamente. Além disso, a segunda linha de (3.3.11) neste regime terá maior contribuição na vizinhança de $u = 0$. Existem, portanto, $\epsilon > 0$ e uma constante $C(\epsilon) > 0$ tal que $\frac{\beta}{4\pi} - \epsilon > 1$ e o coeficiente $a_2^-(t)$ é majorado por baixo

$$a_2^-(t) \geq C(\epsilon) \left(\frac{1}{\kappa(t_0)} \left(\frac{\kappa(t_0)}{\kappa(t)} \right)^{\frac{\beta}{4\pi} - \epsilon} - \frac{1}{\kappa(t)} \right), \quad (3.3.13)$$

que também diverge no limite $t_0 \rightarrow -\infty$. Portanto, $a_2^-(t)$ diverge quando o *cutoff* é removido. Novamente, este resultado concorda com a conjectura BGN. Então, para que possamos avaliar a convergência da série de Mayer para o próximo threshold, precisamos conseguir regularizar o termo $a_2(t)$, isto é, torna-lo finito. Note que o resultado acima prevê divergência para $\beta > 4\pi$ para $a_2(t)$ mas não diz nada a respeito dos thresholds postulados anteriormente. De fato, mostraremos a seguir que nosso modelo prevê intervalos intermediários de temperatura (recíproca) quando comparados aos thresholds de BGN. Esses intervalos podem ser encontrados também em [9].

3.4 A série de Mayer para $4\pi < \beta < 16\pi/3$

Voltemos nossa atenção novamente à equação diferencial (3.2.9). Dessa vez, vamos analisar seu comportamento quando $k = 2$. De acordo com a discussão feita na seção 3.2, paralelamente à desigualdade (3.2.10), teremos nesse caso

$$\dot{C}_n^{(2)}(t) = -\frac{(n-3)}{2}\dot{B}(t)C_n^{(2)}(t) + \frac{n\Gamma_2(t)}{2}\sum_{j=1}^{n-1}C_j^{(2)}(t)C_{n-j}^{(2)}(t) \leq \frac{n\Gamma_2(t)}{2}\sum_{j=1}^{n-1}C_j^{(2)}(t)C_{n-j}^{(2)}(t), \quad (3.4.1)$$

para todo $n \geq 3$. Note que as condições iniciais da equação (3.2.9) independem da escolha de k e por isso não as explicitamos neste momento. Além disso, $\Gamma_2(t)$, dado por (3.2.5) para $k = 2$, é dado explicitamente por

$$\Gamma_2(t) = \Gamma(t) \exp\left(-\frac{3}{2}\int_{t_0}^t B(s')ds'\right). \quad (3.4.2)$$

Novamente, denotamos por $\tilde{C}_n^{(2)}$ a solução de (3.4.1) com igualdade estrita, isto é

$$\dot{\tilde{C}}_n^{(2)}(t) = \frac{n\Gamma_2(t)}{2}\sum_{j=1}^{n-1}\tilde{C}_j^{(2)}(t)\tilde{C}_{n-j}^{(2)}(t), \quad (3.4.3)$$

com condições iniciais $\tilde{C}_1^{(2)}(t) \equiv 1$ e $\tilde{C}_n^{(2)}(t_0) = 1$ para todo $n \geq 2$. Analogamente ao caso $k = 1$, (3.4.3) é exatamente igual à equação diferencial (2.5.48) com $\Gamma(t)$ substituído por $\Gamma_2(t)$. Por conta de (2.5.45), (2.5.49) e da Proposição 1.8.1, temos

$$\tilde{C}_n^{(2)}(t) = \frac{(n\tau_2)^{n-1}}{n!} \quad \text{onde} \quad \tau_2 \doteq \int_{t_0}^0 \Gamma_2(s)ds = \int_{t_0}^0 \Gamma(s) \exp\left(\frac{3}{2}\int_{t_0}^0 B(s')ds'\right)ds. \quad (3.4.4)$$

Mantendo-se o potencial de Yukawa regularizado, a discussão acima juntamente com (3.2.16) nos leva a concluir que valem as desigualdades a seguir

$$nb_{\Lambda,n} \leq \frac{1}{(n-1)!} a_n(t) \leq f_2^{n-1}(t) C_n^{(2)}(t) \leq f_2^{n-1}(t) \tilde{C}_n^{(2)}(t), \quad \forall n \geq 3 \quad t \in [t_0, 0], \quad (3.4.5)$$

e onde os coeficientes presentes nas desigualdades acima dizem respeito à série de potências em z . Veja que as conclusões obtidas na seção 3.2 não se estendem naturalmente para o caso em que $k = 2$. Em primeiro lugar, a majoração (3.4.5) é válida para $n \geq 3$ o que indica que perdemos informação à respeito do coeficiente $C_2^{(2)}(t)$. Se $k = 1$ o mesmo acontecia para o coeficiente $C_1^{(1)}(t)$, o que não nos gerou nenhuma dificuldade uma vez que este termo é, por hipótese, identicamente igual a 1. Entretanto, não obtemos explicitamente o coeficiente $C_2^{(2)}(t)$, de forma que a desigualdade (3.4.5) não contém toda a informação necessária para a convergência da série de Mayer mesmo mantendo-se o potencial de Yukawa regularizado. De qualquer forma, $C_2^{(2)}(t)$ sempre pode ser obtido através da equação diferencial que precede a desigualdade (3.4.1), embora a solução dessa equação possa ser bastante complicada.

Mesmo sem informação à respeito do coeficiente 2, ainda queremos saber se vale a desigualdade (3.4.5) quando fixamos $t = 0$ e tomamos o limite $t_0 \rightarrow -\infty$. Para isso, o primeiro passo consiste em encontrar o intervalo de temperatura (recíproca) β no qual $\tilde{C}_n(t) \doteq f_2^{n-1}(t) \tilde{C}_n^{(2)}(t)$ são todos finitos. Procedemos então como em (3.2.17)

$$\begin{aligned} \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \int_{t_0}^0 \frac{d\kappa(s)}{ds} \frac{1}{\kappa^2(s)} \exp \left(\frac{3}{2} \int_s^0 \frac{\beta}{8\pi} \frac{d}{ds'} (-\ln \kappa(s')) ds' \right) ds &= \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \int_{t_0}^0 -\frac{d\kappa(s)}{ds} \frac{1}{\kappa^2(s)} \kappa^{\frac{3\beta}{16\pi}}(s) ds \\ &= \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \frac{16\pi}{16\pi - 3\beta} \kappa^{\frac{3\beta}{16\pi} - 1}(s) \Big|_{t_0}^0 \\ &= \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \frac{16\pi}{16\pi - 3\beta} (1 - \kappa^{\frac{3\beta}{16\pi} - 1}(t_0)), \end{aligned} \quad (3.4.6)$$

de forma que $\tilde{C}_n(t)$ são todos finitos dado que $\beta < 16\pi/3$, com a desigualdade estrita considerando que o denominador $16\pi - 3\beta$ presente na última linha de (3.4.6) não pode se anular.

Em um primeiro momento, podemos ser erroneamente levados a crer que se $\beta < 16\pi/3$ valerá (3.4.5), de forma que precisamos apenas estudar o comportamento de $C_2^{(2)}(t) \equiv f_2^{n-1}(t) C_n^{(2)}(t)$. De fato, essa conclusão é *parcialmente* verdadeira, e precisamos ser um pouco mais cautelosos nessa análise. Com efeito, a última seção nos mostrou que os coeficientes $a_2(t)$ divergem se $\beta > 4\pi$ e, portanto, $a_2(t)$ divergirá dado que $\beta \in (4\pi, 16\pi/3)$. Como os coeficientes $C_n^{(k)}(t)$ foram obtidos diretamente das equações integrais

dos coeficientes $a_n(t)$, a desigualdade $a_n(t) \leq (n-1)!C_n^{(2)}(t)$ vale também no limite $t_0 \rightarrow -\infty$, o que mostra a divergência de $C_2^{(2)}(t)$. Por fim, tanto os $a_n(t)$ quanto os $C_n^{(k)}(t)$ são obtidos de maneira recursiva, de forma que a divergência dos respectivos termos com $n = 2$ e $k = 2$ causará a divergência dos termos $n \geq 3$. Segue então que, se $\beta \in (4\pi, 16\pi/3)$, a desigualdade (3.4.5) *não se mantém verdadeira no limite em que* $t_0 \rightarrow -\infty$.

Os problemas discutidos acima devem poder ser contornados uma vez que regularizemos os coeficientes $a_2(t)$, dado que este termo é o responsável pelas divergências vistas nos termos de ordem maior. Vamos esboçar abaixo o procedimento que iremos adotar no restante desse trabalho:

1. Primeiramente vamos introduzir em (2.5.30) um multiplicador de Lagrange (c.f. [22] e [23]) com o objetivo de regularizar o coeficiente $C_2(t)$. As equações dos coeficientes $n \geq 3$ permanecerão inalteradas salvo que, agora, dependerão não mais de $C_2(t)$ mas de sua regularização.
2. Partindo explicitamente da definição dos $a_n(t)$ para $n \geq 3$ regularizaremos os coeficientes $a_2(t)$. Fisicamente, isso significa que poderemos eliminar o colapso dos dipolos neutros dentro de clusters de ordem $n \geq 3$ através do procedimento de regularização de $a_2(t)$.
3. Por fim, mostraremos que $a_2(t)$ regularizado obedece a desigualdade (3.4.5) quando comparado com o coeficiente $C_2(t)$ regularizado. Além disso, veremos que a desigualdade valerá para $n \geq 3$. A conclusão a ser obtida neste ponto é que a regularização do coeficiente $C_2(t)$ obtida com a introdução de um multiplicador de Lagrange equivale a uma forma simples de regularizar o $a_2(t)$; de outra forma, a equação majorante (2.5.30) modificada por um multiplicador de Lagrange representa uma equação majorante para a série de Mayer original com o coeficiente $a_2(t)$ regularizado.

Uma vez obtidos os resultados mencionados acima, a convergência da série de Mayer estará garantida eliminando-se o termo $b_{\Lambda,2}$ da série (1.3.25), como prevê a conjectura de BGN. Note que ambas as regularizações 1 e 2 acima devem ser feitas. Com efeito, se apenas regularizássemos os coeficientes $C_2(t)$, a introdução de um multiplicador de Lagrange que não pertencia antes à equação original poderia representar uma distorção do problema original, e poderíamos não obter vínculo algum entre os novos coeficientes regularizados e a série original. Também precisamos mostrar que uma regularização direta dos coeficientes $a_2(t)$ é possível e, por fim, que ambas as regularizações se conectam ao se mostrar que a relação de majoração permanece intacta.

Vamos encerrar esta seção efetuando o primeiro dos três tópicos acima. Em (2.5.30) introduzimos um multiplicador de Lagrange $L_2 = L_2(t) \doteq \frac{1}{2}z\theta_z(t, 0)$

$$\theta_t(t, z) = \Gamma(t)(z\theta^2(t, z) + z^2\theta(t, z)\theta_z(t, z)) + \dot{B}(t)(\theta(t, z) + z\theta_z(t, z) - 1) - L_2(t). \quad (3.4.7)$$

Utilizamos a expansão (2.5.45) na nova equação diferencial (3.4.7), de forma a obter

$$\dot{C}_n(t) = \frac{3}{2}(n-1)B(t)C_n(t) + \frac{n\Gamma(t)}{2} \sum_{j=1}^{n-1} C_j(t)C_{n-j}(t). \quad (3.4.8)$$

Note que (3.4.8) difere de (2.5.47) pelo fator n que multiplica $B(t)C_n(t)$, que foi modificado por $(3/2)(n-1)$. Agora, utilizando a mudança de variáveis $zf_2(t) = \omega$, com $f_2(t)$ definido em (3.2.1) com $k = 2$, a equação diferencial acima se torna

$$\begin{aligned} \dot{C}_2^{(2)}(t) &= \Gamma_2(t), \\ \dot{C}_n^{(2)}(t) &= -\left(\frac{n-3}{2}\right)B(t)C_n^{(2)} + \frac{n\Gamma_2}{2} \sum_{j=1}^{n-1} C_j^{(2)}(t)C_{n-j}^{(2)}(t) \quad \text{se } n \geq 3, \end{aligned} \quad (3.4.9)$$

com $C_1^{(2)}(t) \equiv 1$ e $C_n^{(2)}(t_0) = 1$ para todo $n \geq 3$. Vale apontar que a $\dot{C}_2^{(2)}(t)$ satisfaz exatamente a equação (3.4.3) para $n = 2$, isto é, a inserção do multiplicador de Lagrange torna o coeficiente $C_2^{(2)}(t)$ exatamente igual ao termo $\tilde{C}_2^{(2)}(t)$ da série majorante. Isso mostra que de fato regularizamos $C_2^{(2)}(t)$, uma vez que o transformamos em um coeficiente finito no intervalo $\beta < 16\pi/3$. Além disso, para todo $n \geq 3$ a podemos majorar $C_n^{(2)}(t)$ por (3.4.3), com $C_2^{(2)}(t) = \tilde{C}_2^{(2)}(t)$ regularizado. Segue que os coeficientes $C_n^{(2)}(t)$ permanecem inalterados salvo a regularização do coeficiente 2, como mencionado acima. Nas próximas seções, estabeleceremos as relações entre o procedimento acima e a regularização direta dos coeficientes $a_n(t)$, de forma a obedecer a linha de raciocínio dos tópicos 1 a 3 acima, bem como sua conclusão.

3.5 Regularização dos coeficientes $a_2(t)$ para $\beta \in (4\pi, 6\pi)$

Como discutimos na seção anterior, a divergência dos coeficientes $a_2(t)$ dado que $\beta > 4\pi$ acaba gerando divergências dos coeficientes de ordem superior. Precisamos então regularizar cada $a_n(t)$ através de um procedimento que consiga extrair a divergência dos dipolos presentes no interior de cada cluster de ordem n . Para isso, considere $n \geq 3$, $I = \{1, 2\}$ e denotemos por I^c o conjunto $\{3, \dots, n\}$. Como queremos controlar

os dipolos presentes nos clusters que o contém, uma consulta rápida na relação (2.5.7) nos motiva a definir o seguinte objeto

$$F(s, t, P_n \vec{\xi}) \doteq e^{-\int_s^t \dot{U}_n(\tau, \vec{\xi}) d\tau} \sum_{\substack{i=1,2 \\ j \in I^c}} \sigma_i \sigma_j \dot{v}(s, |x_i - x_j|) \psi_2^c(s, P_I \vec{\xi}). \quad (3.5.1)$$

Agora, veja que

$$\begin{aligned} \int_{\Lambda^2} d\rho(\xi_1) d\rho(\xi_2) F(s, t, P_n \vec{\xi}) &= \int_{\Lambda^2} d\rho(\xi_1) d\rho(x_2) e^{-\int_s^t \dot{U}_n(\tau, \vec{\xi}) d\tau} \sum_{\substack{i=1,2 \\ j \in I^c}} \sigma_i \sigma_j \dot{v}(s, |x_i - x_j|) \psi_2^c(s, P_I \vec{\xi}) \\ &= \sum_{\sigma_1, \sigma_2 \in \{-1, 1\}} \int d^2 x_1 d^2 x_2 e^{-\int_s^t \dot{U}_n(\tau, \vec{\xi}) d\tau} \sum_{\substack{i=1,2 \\ j \in I^c}} \sigma_i \sigma_j \dot{v}(s, |x_i - x_j|) \psi_2^c(s, P_I \vec{\xi}). \end{aligned} \quad (3.5.2)$$

Denotando ainda $\Pi_{\pm} = (1 \pm \sigma_1 \sigma_2)/2$, podemos escrever

$$\int d\rho(\xi_1) d\rho(\xi_2) \Pi_{\pm} F(s, t, P_n \vec{\xi}) \doteq \sum_{\sigma_1, \sigma_2 \in \{-1, 1\}} \int d^2 x_1 d^2 x_2 \Pi_{\pm} e^{-\int_s^t \dot{U}_n(\tau, \vec{\xi}) d\tau} \sum_{\substack{i=1,2 \\ j \in I^c}} \sigma_i \sigma_j \dot{v}(s, |x_i - x_j|) \psi_2^c(s, P_I \vec{\xi}). \quad (3.5.3)$$

Vamos avaliar cada um dos casos $\pm$ presentes em (3.5.3) separadamente. Utilizando as relações (2.5.3) e (2.5.4), podemos escrever

$$\begin{aligned} \int d\rho(\xi_1) d\rho(\xi_2) \Pi_+ F(s, t, P_n \vec{\xi}) &\leq \int d\rho(\xi_1) d\rho(\xi_2) e^{n\gamma(s, t)} \Pi_+ \sum_{\substack{i=1,2 \\ j \in I^c}} |\sigma_i \sigma_j \dot{v}(s, |x_i - x_j|)| |\psi_2^c(s, P_I \vec{\xi})| \\ &= \sum_{\substack{i=1,2 \\ j \in I^c}} \int d\rho(\xi_1) d\rho(\xi_2) e^{n\gamma(s, t)} \Pi_+ |\dot{v}(s, |x_i - x_j|)| |\psi_2^c(s, P_I \vec{\xi})|, \end{aligned} \quad (3.5.4)$$

onde, na segunda linha de (3.5.4) utilizamos o fato de que $|\sigma_i \sigma_j| = 1$, apenas. Note que existem duas somas presentes nesta última relação: uma soma sobre os índices i e uma sobre os índices j . Consideremos o primeiro termo da soma sobre o índice i , isto é, tomemos $i = 1$ em (3.5.4). As seguintes estimativas

podem ser feitas

$$\begin{aligned}
\int d\rho(\xi_1)d\rho(\xi_2)e^{n\gamma(s,t)}\Pi_+|\dot{v}(s,|x_1-x_2|)|\psi_2^c(s,P_I\vec{\xi})| &\leq \int d^2x_2e^{n\gamma(s,t)}|\dot{v}(s,|x_1-x_j|)|\sup_{\xi_1}\int d\rho(\xi_2)\Pi_+|\psi_2^c(s,P_I\vec{\xi})| \\
&\leq e^{n\gamma(s,t)}\Gamma(s)\sup_{\xi_1}\int d^2x_2\left|\frac{1}{2}\sum_{\sigma_1,\sigma_2\in\{-1,1\}}\Pi_+\psi_2^c(s,\xi_1,\xi_2)\right| \\
&= e^{n\gamma(s,t)}\Gamma(s)a_2^+(s).
\end{aligned} \tag{3.5.5}$$

A estimativa para $i = 2$ é análoga, salvo o fato de que o supremo da integral de $|\psi_2^c(s,P_I\vec{\xi})|$ será tomado sobre ξ_2 . Assim, inserindo essas estimativas em (3.5.4), obtemos

$$\int d\rho(\xi_1)d\rho(\xi_2)\Pi_+F(s,t,P_n\vec{\xi}) \leq \sum_{j\in I^c} 2e^{n\gamma(s,t)}\Gamma(s)a_2^+(s) = |I||I^c|e^{n\gamma(s,t)}\Gamma(s)a_2^+(s), \tag{3.5.6}$$

já que $|I| = 2$. Como vimos anteriormente, $a_2^+(t)$ é limitado, o que mostra que a parte positiva de (3.5.3) não precisa ser regularizada. Esse fato é esperado, já que o projetor Π_+ mantém na integral (3.5.3) apenas as contribuições dos termos não neutros, termos esses que não devem colapsar. Assim, a divergência de $a_2(t)$ está ligada, como mostra (3.5.6), com a parte negativa de (3.5.3), que será nosso objeto de estudo a partir de agora.

A análise do caso $a_2^-(t)$ é delicada e precisaremos introduzir algumas ferramentas novas. Sejam $x_1, x_2 \in \mathbb{R}^2$ dois pontos no plano. O conjunto de todos os pontos $x = x(\alpha)$ contido na semi-reta que liga x_1 a x_2 pode ser escrito como $x(\alpha) = \alpha x_1 + (1 - \alpha)x_2$, onde $\alpha \in [0, 1]$. Assumindo que $\dot{v}$ seja diferenciável nas variáveis posição x , e considerando explicitamente o caso particular $\sigma_1\sigma_2 = -1$, valem as identidades

$$\begin{aligned}
\sum_{j=1,2} \dot{v}(s,|x_i-x_j|)\sigma_j &= \sigma_1 \int_0^1 d\alpha \frac{d}{d\alpha} \dot{v}(\tau,|x_i-x(\alpha)|) \\
&= \sigma_1 \int_0^1 d\alpha f_i(\tau,\alpha) \cdot (x_2 - x_1) \\
&= \sigma_1|x_1 - x_2| \int_0^1 d\alpha |f_i(\tau,\alpha)| \cos(\theta_i(\alpha) - \theta).
\end{aligned} \tag{3.5.7}$$

Em (3.5.7), θ é o ângulo formado pela reta ligando x_1 a x_2 e o eixo x no plano cartesiano, enquanto que $\theta_i(\alpha)$ é o ângulo formado entre a reta que liga x_j a um $x(\alpha)$ arbitrário e o eixo x do plano. Das relações

presentes em (3.5.7) é fácil obter a forma explícita de $f_i(\tau, \alpha)$

$$f_i(\tau, \alpha) = -\frac{\beta}{4\pi} \frac{d\kappa(\tau)}{d\tau} \frac{1}{\sqrt{\kappa(\tau)}} h'(\sqrt{\kappa(\tau)} |x_i - x(\alpha)|) \frac{x_i - x(\alpha)}{|x_i - x(\alpha)|}. \quad (3.5.8)$$

Defina

$$V(\tau, \theta) \doteq \int_0^1 d\alpha \sum_{i \in I^c} \sigma_i |f_i(\tau, \alpha, \theta)| \cos(\theta_i(\alpha, \theta) - \theta). \quad (3.5.9)$$

A notação acima será útil no restante desta seção. Voltemos à relação (3.5.3) com projetor Π_- que permite apenas contribuições de cargas opostas. A integral à direita nessa relação contém uma exponencial cujo expoente pode ser escrito de maneira alternativa, levando em conta a notação anterior. Com efeito, note que

$$\begin{aligned} \dot{U}_n(\tau, \vec{\xi}) &= \sum_{1 \leq i < j \leq n} \sigma_i \sigma_j \dot{v}(s, |x_i - x_j|) \\ &= \sigma_1 \sigma_2 \dot{v}(\tau, |x_1 - x_2|) + \sum_{i \in I^c} \sum_{j=1,2} \sigma_i \sigma_j \dot{v}(\tau, |x_i - x_j|) + \sum_{3 \leq i < j \leq n} \sigma_i \sigma_j \dot{v}(\tau, |x_i - x_j|) \\ &= \sigma_1 \sigma_2 \dot{v}(\tau, |x_1 - x_2|) + \sigma_1 \sum_{i \in I^c} \sigma_i |x_1 - x_2| \int_0^1 d\alpha |f_i(\tau, \alpha)| \cos(\theta_i(\alpha) - \theta) + \sum_{3 \leq i < j \leq n} \dot{v}(\tau, |x_i - x_j|) \\ &= \sigma_1 \sigma_2 \dot{v}(\tau, |x_1 - x_2|) + \sigma_1 |x_1 - x_2| V(\tau, \theta) + \sum_{3 \leq i < j \leq n} \sigma_i \sigma_j \dot{v}(\tau, |x_i - x_j|). \end{aligned} \quad (3.5.10)$$

Substituindo (3.5.9) em (3.5.3) com projetor Π_- , temos

$$\begin{aligned} e^{-\int_s^t d\tau \sum_{3 \leq i < j \leq n} \sigma_i \sigma_j \dot{v}(\tau, |x_i - x_j|)} \sum_{\sigma_1, \sigma_2 \in \{-1, 1\}} \int d^2 x_1 d^2 x_2 e^{-\sigma_1 \sigma_2 \int_s^t d\tau \dot{v}(\tau, |x_1 - x_2|)} e^{\int_s^t d\tau \sigma_1 |x_1 - x_2| V(\tau, \theta)} \times \\ \times \sum_{\substack{j=1,2 \\ i \in I^c}} \sigma_i \sigma_j \dot{v}(s, |x_i - x_j|) \Pi_- \psi_2^c(s, \xi_1, \xi_2). \end{aligned} \quad (3.5.11)$$

Agora entramos em um ponto central da argumentação. As funções de Ursell $\psi_2^c(s, \xi_1, \xi_2)$ dependem apenas do produto $\sigma_1 \sigma_2$ e da distância $r = |x_1 - x_2|$, como pode ser visto em (3.3.1). Isso implica que podemos adotar o seguinte procedimento: fixamos $y = x(\alpha = 1/2)$ o *ponto médio* entre x_1 e x_2 e, em seguida, redefinimos os eixos coordenados como sendo formados pela reta que passa por x_1 e x_2 e uma

reta ortogonal à ela que passe por y . Isso significa que podemos escrever então

$$\begin{aligned}x_1 &= y - (r/2 \cos \theta, r/2 \sin \theta), \\x_2 &= y + (r/2 \cos \theta, r/2 \sin \theta).\end{aligned}\tag{3.5.12}$$

Portanto, a integral em $d^2x_1 d^2x_2$ presente em (3.5.11) se transformará em $d^2y r/2 dr d\theta$. Somado à isso, novamente a soma $\sum_{\sigma_1, \sigma_2 \in \{-1, 1\}}$ em (3.5.11) só levará em conta dos termos $\sigma_1 \sigma_2 = -1$ por conta do projetor Π_- . Considerando essas últimas observações, (3.5.11) se transforma na seguinte integral

$$e^{-\int_s^t d\tau \sum_{3 \leq i < j \leq n} \sigma_i \sigma_j \dot{v}(\tau, |x_i - x_j|)} \frac{1}{2} \int d^2y \int \left[\int_0^{2\pi} d\theta V(s, \theta) \sinh \left(r \int_s^t V(\tau, \theta) d\tau \right) \right] e^{\int_s^t d\tau \dot{v}(\tau, r)} \psi_2^c(s, -1, r) r^2 dr,\tag{3.5.13}$$

onde, por conta de (2.4.28) e (3.3.6), escrevemos

$$\psi_2^c(s, -1, r) = \frac{\beta}{4\pi} \int_{t_0}^s -\frac{d\kappa(\bar{s})}{d\bar{s}} h(\sqrt{\kappa(\bar{s})}r) \exp \left(\frac{\beta}{4\pi} \int_{\bar{s}}^s -\frac{d\kappa(\tau)}{d\tau} \frac{1}{\kappa(\tau)} h(\sqrt{\kappa(\tau)}r) d\tau \right) d\bar{s}.\tag{3.5.14}$$

A integral em θ em (3.5.12) é bastante complicada de ser resolvida. Entretanto, o seno hiperbólico nela presente é função também de r , cuja integral também deve ser obtida. Uma forma de se resolver essa dificuldade é utilizar *Primeiro Teorema do Valor Médio para Integrais* (PTVM):

Teorema 3.5.1. (*Primeiro Teorema do Valor Médio para Integrais*) *Existe $\theta^* \in [0, 2\pi]$ tal que vale a igualdade*

$$\int_0^{2\pi} V(s, \theta) \sinh \left(r \int_s^t V(\tau, \theta) d\tau \right) d\theta = V(s, \theta^*) \sinh \left(r \int_s^t V(\tau, \theta^*) d\tau \right),\tag{3.5.15}$$

uma vez que a desigualdade abaixo é satisfeita

$$\int_s^t V(\tau, \theta^*) d\tau \geq 0.\tag{3.5.16}$$

Demonstração. O Teorema 3.5.1 é apenas uma aplicação do caso geral, cujo enunciado e a demonstração podem ser encontrados em [34]. $\square$

De posse do Teorema 3.5.1, podemos eliminar uma das integrais presentes em (3.5.12), de forma que essa expressão se transforma na seguinte

$$e^{-\int_s^t d\tau \sum_{3 \leq i < j \leq n} \sigma_i \sigma_j \dot{v}(\tau, |x_i - x_j|)} \int d^2y \int \left[\pi V(s, \theta^*) \sinh \left(r \int_s^t V(\tau, \theta^*) d\tau \right) \right] e^{\int_s^t d\tau \dot{v}(\tau, r)} \psi_2^c(s, -1, r) r^2 dr.\tag{3.5.17}$$

Vamos esquecer provisoriamente o termo exponencial $e^{-\int_s^t d\tau \sum_{3 \leq i < j \leq n} \sigma_i \sigma_j \dot{v}(\tau, |x_i - x_j|)}$ em (3.5.17), nos preocupando apenas em avaliar as integrais que o multiplicam e também utilizar, por simplicidade, a seguinte notação

$$\zeta_{s,t} \doteq \int_s^t V(\tau, \theta^*) d\tau. \quad (3.5.18)$$

Utilizando explicitamente a relação (2.5.17), à parte da exponencial mencionada, (3.5.17) pode ser escrita de forma alternativa, a saber

$$\frac{\beta}{4} \int d^2 y V(s, \theta^*) \int_0^\infty r^2 dr \int_{t_0}^s \sinh(r \zeta_{s,t}) e^{-\frac{\beta}{4\pi} \int_s^t d\tau \frac{d\kappa(\tau)}{d\tau} \frac{1}{\kappa(\tau)} h(\sqrt{\kappa(\tau)} r)} \frac{-d\kappa(\bar{s})}{d\bar{s}} \frac{1}{\kappa(\bar{s})} h(\sqrt{\kappa(\bar{s})} r) d\bar{s}. \quad (3.5.19)$$

Agora, façamos duas mudanças de variável convenientes. Em primeiro lugar, escrevemos $d\kappa(\tau) = (d\kappa(\tau)/d\tau) d\tau$ na exponencial em (3.5.19)³

$$e^{-\frac{\beta}{4\pi} \int_s^t d\tau \frac{d\kappa(\tau)}{d\tau} \frac{1}{\kappa(\tau)} h(\sqrt{\kappa(\tau)} r)} = e^{-\frac{\beta}{4\pi} \int_{\kappa(s)}^{\kappa(t)} \frac{d\kappa}{\kappa} h(\sqrt{\kappa} r)}. \quad (3.5.20)$$

A segunda alteração consiste na mudança $\omega = r\sqrt{\kappa(\bar{s})}$, com $\sqrt{\kappa(\bar{s})} dr = d\omega$. Implementando ambas as mudanças acima em (3.5.20), podemos escrever essa expressão de maneira mais simples

$$\frac{\beta}{4\pi} \int d^2 y V(s, \theta^*) \int_0^\infty \omega^2 h(\omega) \left[\int_{t_0}^s \sinh\left(\frac{\omega}{\sqrt{\kappa(\bar{s})}} \zeta_{s,t}\right) e^{-\frac{\beta}{4\pi} \int_{\kappa(s)}^{\kappa(t)} \frac{d\kappa}{\kappa} h(\sqrt{\kappa} r)} \frac{d\kappa(\bar{s})}{d\bar{s}} \frac{1}{\kappa^{\frac{5}{2}}(\bar{s})} d\bar{s} \right] d\omega. \quad (3.5.21)$$

As integrais acima serão analisadas separadamente. Para simplificar o raciocínio, vamos denotar por $\mathcal{I}$ a integral com respeito à variável $\bar{s}$

$$\mathcal{I} \doteq \int_{t_0}^s \sinh\left(\frac{\omega}{\sqrt{\kappa(\bar{s})}} \zeta_{s,t}\right) e^{-\frac{\beta}{4\pi} \int_{\kappa(s)}^{\kappa(t)} \frac{d\kappa}{\kappa} h(\sqrt{\kappa} r)} \frac{d\kappa(\bar{s})}{d\bar{s}} \frac{1}{\kappa^{\frac{5}{2}}(\bar{s})} d\bar{s}. \quad (3.5.22)$$

Vamos abrir um parênteses aqui para considerar uma relação que aparecerá com frequência no restante da seção e diz respeito ao termo de auto-energia do dipolo representado pela integral $\int_{\bar{s}}^t d\tau \dot{v}(\tau, \omega/\sqrt{\kappa(\bar{s})})$. Podemos escrever esse termo de várias formas diferentes

$$\begin{aligned} \frac{\beta}{2\pi} \left(K_0(\omega \sqrt{\kappa(t)/\kappa(\bar{s})}) - K_0(\omega) \right) &= \frac{\beta}{4\pi} \int_{\bar{s}}^t -\frac{d\kappa(\tau)}{d\tau} \frac{1}{\kappa(\tau)} h(\omega \sqrt{\kappa(\tau)/\kappa(\bar{s})}) d\tau \\ &= \frac{\beta}{4\pi} \int_{\kappa(\bar{s})}^{\kappa(t)} d(-\ln \kappa) h(\omega \sqrt{\kappa/\kappa(\bar{s})}) \\ &= \frac{\beta}{4\pi} h(\omega \sqrt{\hat{\kappa}/\kappa(\bar{s})}) \ln \frac{\kappa(\bar{s})}{\kappa(t)} \leq \frac{\beta}{4\pi} \ln \frac{\kappa(\bar{s})}{\kappa(t)}, \end{aligned} \quad (3.5.23)$$

³Vamos omitir a dependência de τ das funções κ sempre que conveniente

para algum $\hat{\kappa}$ que obedeça $\kappa(t) \leq \hat{\kappa} \leq \kappa(\bar{s})$. Note que, nas relações acima, utilizamos não só o PTVM mas também o fato de que h é monótona decrescente, com $h(0) = 1$. Podemos agora continuar nossa análise. Denotamos por

$$G(\hat{\kappa}, \bar{\kappa}, r) \doteq \sinh(r\zeta_{s,t}) \exp\left(-\frac{\beta}{4\pi} \int_{\bar{\kappa}}^{\hat{\kappa}} \frac{d\kappa}{\kappa} h(r\sqrt{\kappa})\right), \quad (3.5.24)$$

para escrever (3.5.22) de maneira mais compacta

$$\mathcal{I} = \int_{t_0}^s -\frac{d\kappa(\bar{s})}{d\bar{s}} \frac{1}{\kappa^{\frac{5}{2}}(\bar{s})} G(\kappa(t), \kappa(\bar{s}), \omega/\sqrt{\kappa(\bar{s})}) d\bar{s}. \quad (3.5.25)$$

Fazemos em (3.5.25) a mudança de variável $z = 1/(\kappa(\bar{s}))^\delta$, onde δ por enquanto é um parâmetro livre não negativo que será escolhido em um momento oportuno. A inclusão desse parâmetro faz com que o Jacobiano dessa transformação carregue consigo um termo $1/\delta$. Temos então

$$\begin{aligned} \mathcal{I} &= \int_{t_0}^s -\frac{d\kappa(\bar{s})}{d\bar{s}} \frac{1}{\kappa^{\frac{5}{2}}(\bar{s})} G(\kappa(t), \kappa(\bar{s}), \omega/\sqrt{\kappa(\bar{s})}) d\bar{s} \\ &= \frac{1}{\delta} \int_{1/\kappa(t_0)^\delta}^{1/\kappa(s)^\delta} z^{\frac{3}{2\delta}-1} G(\kappa(t), z^{-\frac{1}{\delta}}, \omega) dz \\ &= \frac{1}{\delta} \frac{1}{(\kappa^*)^{\frac{3}{2}-\delta}} \left(\frac{1}{\kappa(s)^\delta} - \frac{1}{\kappa(t_0)^\delta} \right) G(\kappa(t), \kappa^*, \omega/\sqrt{\kappa^*}) \\ &= \frac{1}{\delta} \frac{1}{(\kappa^*)^{\frac{3}{2}-\delta}} \left(\frac{1}{\kappa(s)^\delta} - \frac{1}{\kappa(t_0)^\delta} \right) G(\kappa(t), \kappa(s), \omega/\sqrt{\kappa^*}) e^{-\frac{\beta}{4\pi} \int_{\kappa^*}^{\kappa(s)} \frac{d\kappa}{\kappa} h(\sqrt{\kappa/\kappa^*}\omega)}. \end{aligned} \quad (3.5.26)$$

Da segunda linha para a terceira linha em (3.5.26) utilizamos o PTVM para encontrar um $(z^*)^{\frac{1}{\delta}} = \frac{1}{\kappa^*} \equiv \frac{1}{\kappa(s^*)}$ dentro do intervalo $(1/\kappa(t_0)^\delta, 1/\kappa(s)^\delta)$, satisfazendo as desigualdades

$$0 < \frac{1}{\kappa(t_0)} \leq \frac{1}{\kappa^*} \leq \frac{1}{\kappa(s)} \leq 1.$$

Note que o termo entre parênteses em (3.5.26) vem exatamente do PTVM, que multiplica a integral pelo intervalo de integração e avalia o integrando em um ponto intermediário desse domínio. Neste momento, já somos capazes de perceber algo bastante importante à respeito da integral (3.5.21) que é o fato de que $\mathcal{I}$ é limitada superiormente, indicando que (3.5.21) não mais apresente comportamento divergente para $\beta > 4\pi$. Para justificar essa última afirmação, note primeiramente que podemos expandir o seno hiperbólico em Taylor, concluindo que

$$\sinh(\zeta_{s,t}\omega/\sqrt{\kappa(\bar{s})}) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(\omega\zeta_{s,t})^{2j-1}}{(2j-1)!} (\kappa(\bar{s}))^{\frac{1}{2}-j} \leq \frac{1}{\sqrt{\kappa(\bar{s})}} \sinh(\omega\zeta_{s,t}), \quad (3.5.27)$$

e então, aplicando as desigualdades (3.5.23) e (3.5.27) em (3.5.22)⁴, obtemos

$$\begin{aligned}
\mathcal{I} &= \int_{t_0}^s \sinh\left(\frac{\omega}{\sqrt{\kappa(\bar{s})}} \zeta_{s,t}\right) e^{-\frac{\beta}{4\pi} \int_{\kappa(s)}^{\kappa(t)} \frac{d\kappa}{\kappa} h(\sqrt{\kappa}r)} \frac{d\kappa(\bar{s})}{d\bar{s}} \frac{1}{\kappa^{\frac{5}{2}}(\bar{s})} d\bar{s} \\
&\leq \int_{t_0}^s -\frac{d\kappa(\bar{s})}{d\bar{s}} \sinh\left(\frac{\omega}{\sqrt{\kappa(\bar{s})}} \zeta_{s,t}\right) \left(\frac{\kappa(\bar{s})}{\kappa(t)}\right)^{\frac{\beta}{4\pi}} d\bar{s} \\
&\leq \int_{t_0}^s -\frac{d\kappa(\bar{s})}{d\bar{s}} \sinh(\omega \zeta_{s,t}) \frac{1}{\sqrt{\kappa(\bar{s})}} \left(\frac{\kappa(\bar{s})}{\kappa(t)}\right)^{\frac{\beta}{4\pi}} d\bar{s} \\
&= \sinh(\omega \zeta_{s,t}) \int_{t_0}^s -\frac{d\kappa(\bar{s})}{d\bar{s}} \frac{1}{\sqrt{\kappa(\bar{s})}} \left(\frac{\kappa(\bar{s})}{\kappa(t)}\right)^{\frac{\beta}{4\pi}} d\bar{s} \\
&= \sinh(\omega \zeta_{s,t}) (\kappa(t))^{-\frac{\beta}{4\pi}} \int_{t_0}^s -d\kappa(\kappa(\bar{s}))^{\frac{\beta}{4\pi}-3} \\
&= \sinh(\omega \zeta_{s,t}) (\kappa(t))^{\frac{\beta}{4\pi}} \frac{4\pi}{8\pi - \beta} \left(\frac{1}{(\kappa(s))^{\frac{\beta}{4\pi}-2}} - \frac{1}{(\kappa(t_0))^{\frac{\beta}{4\pi}-2}} \right). \tag{3.5.28}
\end{aligned}$$

A relação (3.5.28) é limitada superiormente para todo $\beta < 8\pi$ no limite $t_0 \rightarrow -\infty$.

Para concluir a análise do coeficiente $a_2^-(t)$, precisamos reincorporar (3.5.26) em (3.5.21). Ao se fazer isso, (3.5.21) terá se transformado na integral a seguir

$$\frac{\beta}{4\pi} \int d^2y V(s, \theta^*) \int_0^\infty \omega^2 h(\omega) \left[\frac{1}{\delta} \frac{1}{(\kappa^*)^{\frac{3}{2}-\delta}} \left(\frac{1}{\kappa(s)^\delta} - \frac{1}{\kappa(t_0)^\delta} \right) G(\kappa(t), \kappa(s), \omega/\sqrt{\kappa^*}) e^{-\frac{\beta}{4\pi} \int_{\kappa^*}^{\kappa(s)} \frac{d\kappa}{\kappa} h(\sqrt{\kappa/\kappa^*} \omega)} \right] d\omega. \tag{3.5.29}$$

Reagrupando a exponencial $e^{-\int_s^t d\tau \sum_{3 \leq i < j \leq n} \sigma_i \sigma_j \dot{v}(\tau, |x_i - x_j|)}$ presente em (3.5.17) (recorde que havíamos omitido essa exponencial momentaneamente) à integral (3.5.29), resta-nos avaliar as integrais em y e ω . A primeira delas é feita voltando para trás

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &\doteq \int d^2y V(s, \theta^*) \sinh\left(\frac{\omega}{\sqrt{\kappa^*}} \zeta_{s,t}\right) e^{-\frac{\beta}{4\pi} \int_{\kappa(s)}^{\kappa(t)} \frac{d\kappa}{\kappa} h(\sqrt{\kappa}\omega/\sqrt{\kappa^*})} e^{-\int_s^t d\tau \sum_{3 \leq i < j \leq n} \sigma_i \sigma_j \dot{v}(\tau, |x_i - x_j|)} \\
&= \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2 \in \{-1, 1\}} \Pi_- \int d^2y \sigma_1 \int_0^1 d\alpha \sum_{i \in I^c} |f_i^*(s, \alpha)| \cos(\theta_i^*(\alpha) - \theta^*) e^{-\int_s^t d\tau \sum_{i \in I^c, j \in I} \sigma_i \sigma_j \dot{v}(\tau, |x_i - x_j^*|)}. \tag{3.5.30}
\end{aligned}$$

As notações com $*$ na relação (3.5.30) indicam apenas que, ao voltar para trás na notação, devemos diferenciar os termos provenientes de $\kappa^* = \kappa(s^*)$. Usaremos então a propriedade de estabilidade (2.5.3)

⁴Note que a derivada de $\mathcal{I}$ com respeito à s é sempre não-negativo, mostrando que $\mathcal{I}$ é função monótona crescente de $s \in [t_0, 0]$.

para majorar a exponencial presente nesta última relação, bem como o fato de que $|\cos(\theta_i^*(\alpha) - \theta^*)| \leq 1$. Substituímos também $f_i(\tau, \alpha)$ pela relação explícita encontrada em (3.5.8) e substituímos a soma $\sum_{\sigma_1, \sigma_2 \in \{-1, 1\}}$ por uma soma restrita aos casos $\sigma_1 \sigma_2 = -1$, por conta do projetor Π_- . Isso reduz (3.5.30) consideravelmente

$$\mathcal{H} \leq \frac{1}{2} e^{n\gamma(s,t)} |I^c| \frac{\beta}{4\pi} 2\pi \frac{d\kappa(s)}{ds} \frac{1}{\kappa^{\frac{3}{2}}(s)} \int dy' h(y') y', \quad (3.5.31)$$

onde fizemos a troca de variáveis $\sqrt{\kappa(s)}r = y'$. Como $\kappa(s) \neq 0$, podemos escrever

$$\frac{d\kappa(s)}{ds} \frac{1}{\kappa^{\frac{3}{2}}(s)} = \frac{d\kappa(s)}{ds} \frac{1}{\kappa^{\frac{3}{2}}(s)} \frac{\kappa^{\frac{1}{2}}(s)}{\kappa^{\frac{1}{2}}(s)} = \sqrt{\kappa(s)} \frac{1}{\beta} \Gamma(s), \quad (3.5.32)$$

por conta de (2.3.11), de forma que (3.5.31) se torna

$$\mathcal{H} \leq \frac{\pi}{8} \sqrt{\kappa(s)} e^{n\gamma(s,t)} \Gamma(s) |I^c| |I|. \quad (3.5.33)$$

Chegamos então ao último passo da nossa estimativa, que consiste em avaliar a integral em ω em (3.5.29). Lembrando que nosso ponto de partida foi a relação (3.5.4) com projetor Π_- , obtivemos até aqui a seguinte desigualdade

$$\begin{aligned} & \int d\rho(\xi_1) d\rho(\xi_2) \Pi_- F(s, t, P_n \vec{\xi}) \leq \\ & \leq e^{n\gamma(s,t)} \Gamma(s) |I| |I^c| \frac{\pi}{8} \frac{\beta}{4\pi} \int_0^\infty d\omega h(\omega) \omega^2 \frac{1}{\delta} \left(\frac{1}{(\kappa(s))^\delta} - \frac{1}{(\kappa(t_0))^\delta} \right) \frac{1}{(\kappa^*)^{\frac{3}{2}-\delta}} e^{\frac{\beta}{4\pi} \int_{\kappa^*}^{\kappa(s)} \frac{d\kappa}{\kappa} h(\omega \sqrt{\kappa/\kappa^*})} \sqrt{\kappa(s)}, \end{aligned} \quad (3.5.34)$$

onde identificamos

$$\tilde{a}_2^-(s) = \frac{\pi}{8} \frac{\beta}{4\pi} \int_0^\infty d\omega h(\omega) \omega^2 \frac{1}{\delta} \left(\frac{1}{(\kappa(s))^\delta} - \frac{1}{(\kappa(t_0))^\delta} \right) \frac{1}{(\kappa^*)^{\frac{3}{2}-\delta}} e^{\frac{\beta}{4\pi} \int_{\kappa^*}^{\kappa(s)} \frac{d\kappa}{\kappa} h(\omega \sqrt{\kappa/\kappa^*})} \sqrt{\kappa(s)} \quad (3.5.35)$$

o coeficiente $\tilde{a}_2^-(t)$ regularizado. Utilizando novamente (3.5.23) e reagrupando os termos, majoramos

(3.5.35)

$$\begin{aligned}
\tilde{a}_2^-(s) &\leq \frac{\beta}{4\pi} \int_0^\infty h(\omega) \omega^2 \left(\frac{\kappa(s)}{\kappa^*} \right)^{\frac{3}{2}-\delta-\frac{\beta}{4\pi}} \frac{1}{\delta} \frac{\pi}{8} \frac{1}{\kappa(s)} \left(1 - \left(\frac{\kappa(s)}{\kappa(t_0)} \right)^\delta \right) d\omega \\
&\leq \frac{\beta}{4\pi} \frac{1}{\delta} \frac{\pi}{8} \frac{1}{\kappa(s)} \left(1 - \left(\frac{\kappa(s)}{\kappa(t_0)} \right)^\delta \right) \int_0^\infty \omega^2 h(\omega) d\omega \\
&= \frac{\beta}{4\pi} \frac{\pi}{8} \frac{3\pi}{2} \frac{1}{\delta} \frac{1}{\kappa(s)} \left(1 - \left(\frac{\kappa(s)}{\kappa(t_0)} \right)^\delta \right) \\
&= \frac{3\pi^2}{64} \beta \frac{1}{\delta} \frac{1}{\kappa(s)} \left(1 - \left(\frac{\kappa(s)}{\kappa(t_0)} \right)^\delta \right) \\
&\leq \frac{\beta}{2\delta} \frac{1}{\kappa(s)} \left(1 - \left(\frac{\kappa(s)}{\kappa(t_0)} \right)^\delta \right), \tag{3.5.36}
\end{aligned}$$

onde utilizamos a relação (C.15) do apêndice C e o fato de que $3\pi^2/64 < 1/2$. Obviamente, a majoração acima só é válida no caso em que $3/2-\delta-\beta/4\pi \geq 0$. Escolhemos $\delta = 1-3\beta/16\pi$. Note que $3/2-\delta-\beta/4\pi \geq 0$ se $\beta < 6\pi$. Com essa escolha, (3.5.36) se torna, no regime $\beta < 6\pi$

$$\tilde{a}_2^-(s) \leq \beta \frac{16\pi}{16\pi - 3\beta} \frac{1}{\kappa(s)} \left[1 - \left(\frac{\kappa(t_0)}{\kappa(s)} \right)^{\frac{3\beta}{16\pi}-1} \right] = \frac{1}{2} \int_{t_0}^s \Gamma(\bar{s}) \left(\frac{\kappa(\bar{s})}{\kappa(s)} \right)^{\frac{3\beta}{16\pi}} d\bar{s} = \frac{1}{2} \tilde{C}_2^{(2)}(s) d\bar{s}, \tag{3.5.37}$$

por conta de (3.4.4) e (3.4.6). Unindo (3.5.37) à (3.3.5), obtemos

$$\begin{aligned}
\tilde{a}_2(s) &\doteq a_2^+(s) + \tilde{a}_2^-(s) \leq \int_{t_0}^s \Gamma(\bar{s}) \frac{1}{2} \left(1 + \left(\frac{\kappa(\bar{s})}{\kappa(s)} \right)^{\frac{3\beta}{16\pi}} \right) d\bar{s} \\
&\leq \int_{t_0}^s \Gamma(\bar{s}) \left(\frac{\kappa(\bar{s})}{\kappa(s)} \right)^{\frac{3\beta}{16\pi}} d\bar{s} = \tilde{C}_2(s) = f_2(t) \tilde{C}_n^{(2)}(t). \tag{3.5.38}
\end{aligned}$$

A relação (3.5.38) representa a desigualdade (3.4.5) com o limite $t_0 \rightarrow -\infty$ já tendo sido calculado.

3.6 Primeiras Discussões

Com o fim da seção anterior, os três procedimentos mencionados na seção 3.4 estão quase completos. Vimos que a inclusão de um multiplicador de Lagrange $L_2 = z\theta_z(t, 0)/2$ na equação (2.5.30) nos leva a um novo sistema de equações diferenciais para os coeficientes $C_n(t)$ da série de Mayer no intervalo de temperatura $\beta \in (4\pi, 16\pi/3)$ no qual o coeficiente $C_2(t)$ é regularizado e as demais equações ($n \geq 3$) não se

modificam; entretanto, a recorrência dessas equações acaba por propagar a regularização de $C_2(t)$ para as demais equações do sistema, o que torna todos os coeficientes finitos quando o *cutoff* é removido. Além disso, vimos que o coeficiente $a_2(t)$ pode ser também (e de maneira independente) regularizado, de forma que quando o comparamos com o coeficiente $C_2(t)$ regularizado, a desigualdade (3.4.5) permanece válida para $n = 2$ mesmo quando removemos o *cutoff*. Além disso, como os coeficientes $a_n(t)$ também são obtidos por meio de recorrência, a regularização de $a_2(t)$ também é propagada para os termos $a_{n \geq 3}(t)$, de forma que com todos os termos da desigualdade (3.4.5) permanecendo finitos dentro do intervalo de temperatura mencionado. Reservamos esta seção para as primeiras discussões sobre os resultados obtidos até a seção 3.5.

Se $k = 2$, mostramos que vale a desigualdade $\tilde{a}_2(t) \leq \tilde{C}_2(t)$, ou seja, nossas regularizações (aparentemente) desconectadas dos coeficientes $a_2(t)$ e $C_2(t)$ se conectam ao manter a desigualdade (3.4.5), mesmo quando tomamos o limite $t_0 \rightarrow -\infty$. Como $C_n(t)$ majoram $a_n(t)$ de maneira recursiva, através dos cálculos da seção 2.5, é de se esperar que os termos regularizados $\tilde{a}_2(t)$ e $\tilde{C}_2(t)$ inseridos nas suas respectivas equações de recorrência, propaguem a validade da desigualdade (3.4.5) para todo $n \geq 3$, mesmo quando o *cutoff* é removido. Entretanto, gostaríamos de exemplificar como isso pode ser demonstrado explicitamente e é isso que faremos neste momento. Por conta da recorrência das equações (2.5.47) e (2.5.15), se provarmos que vale $\tilde{a}_3(t) \leq \tilde{C}_3(t)$, onde $\tilde{a}_3(t)$ e $\tilde{C}_3(t)$ são, respectivamente, os novos coeficientes $a_3(t)$ e $C_3(t)$ com $a_2(t)$ e $C_2(t)$ substituídos por $\tilde{a}_2(t)$ e $\tilde{C}_2(t)$, podemos garantir o resultado $\tilde{a}_n(t) \leq \tilde{C}_n(t)$ para todo $n \geq 4$ por simples indução em n . Portanto, basta provarmos a desigualdade $\tilde{a}_3(t) \leq \tilde{C}_3(t)$.

Consideremos então o termo $\tilde{C}_3(t)$ dado por

$$\tilde{C}_3(t) = \frac{3}{2} \left[\int_{t_0}^t \Gamma(s) e^{\frac{3}{2} \int_s^t B(s') ds'} ds \right]^2, \quad (3.6.1)$$

e, além disso, a desigualdade já mencionada

$$\tilde{a}_2(s) \leq \int_{t_0}^s \Gamma(\bar{s}) e^{\frac{3}{2} \int_{\bar{s}}^s B(s') ds'} d\bar{s}. \quad (3.6.2)$$

Por conta de (2.5.11), podemos escrever

$$a_3(t) \leq \frac{3}{2} \int_{t_0}^t \Gamma(s) e^{3 \int_s^t B(s') ds'} \left[\int_{t_0}^s \Gamma(\bar{s}) e^{\frac{3}{2} \int_{\bar{s}}^s B(s') ds'} d\bar{s} \right] ds. \quad (3.6.3)$$

Agora, procedemos da seguinte forma: como $\Gamma(\bar{s})e^{\frac{3}{2}\int_{\bar{s}}^s B(s')ds'}$ é estritamente positivo, vale a desigualdade $\int_{t_0}^s \Gamma(\bar{s})e^{\frac{3}{2}\int_{\bar{s}}^s B(s')ds'} d\bar{s} \leq \int_{t_0}^t \Gamma(\bar{s})e^{\frac{3}{2}\int_{\bar{s}}^s B(s')ds'} d\bar{s}$, já que $t \geq s$. Portanto, temos assim

$$\begin{aligned} a_3(t) &\leq \frac{3}{2} \int_{t_0}^t \Gamma(s) e^{\frac{3}{2}\int_s^t B(s')ds'} e^{\frac{3}{2}\int_s^t B(s')ds'} \left[\int_{t_0}^s \Gamma(\bar{s}) e^{\frac{3}{2}\int_{\bar{s}}^s B(s')ds'} d\bar{s} \right] ds \\ &= \frac{3}{2} \int_{t_0}^t \Gamma(s) e^{\frac{3}{2}\int_s^t B(s')ds'} \left[\int_{t_0}^s \Gamma(\bar{s}) e^{\frac{3}{2}\int_{\bar{s}}^s B(s')ds'} d\bar{s} \right] ds \\ &= \frac{3}{2} \left[\int_{t_0}^t \Gamma(s) e^{\frac{3}{2}\int_s^t B(s')ds'} ds \right]^2 = \tilde{C}_3(t). \end{aligned} \quad (3.6.4)$$

Utilizando o mesmo raciocínio, podemos mostrar indutivamente que vale $\tilde{a}_{n \geq 4}(t) \leq \tilde{C}_{n \geq 4}(t)$, o que conclui a demonstração da convergência da série de Mayer para o gás de Yukawa no intervalo $\beta \in (4\pi, 16\pi/3)$ com termo de ordem 2 omitido.

Agora, como já mencionado, a escolha de δ em (3.5.36) deve satisfazer a desigualdade $3/2 - \delta - \beta/4\pi \geq 0$, o que nos leva a concluir que a regularização de $a_2(t)$ da seção 3.5 vale para todo $\beta < 6\pi$. Esse fato sugere algo bastante interessante: note que pela conjectura BGN, a única divergência que ocorre na série de Mayer no intervalo $\beta \in (4\pi, 6\pi)$ é devido ao termo $a_2(t)$. Mas, se podemos regulariza-lo nesse intervalo, podemos afirmar que, uma vez regularizada, a série de Mayer (com termo de ordem 2 omitido) convergirá não apenas para $\beta \in (4\pi, 16\pi/3)$ como estávamos considerando, mas sim para $\beta \in (4\pi, 6\pi)$? Em outras palavras, a regularização dos coeficientes $a_2(t)$ e $C_2(t)$ como feito anteriormente para $k = 2$ nos fornece gratuitamente a convergência da série (com termo de ordem 2 omitido) para $k = 3$? Como veremos a seguir, este infelizmente não será o caso.

Em seu artigo [8], Brydges alerta para o fato de que se quisermos estender o resultado acima para o caso $k = 3$ (o que equivale a estender a convergência da série de Mayer para $\beta < 6\pi$), devemos melhorar o *bound* de estabilidade dado por (2.5.3), utilizando uma estimativa equivalente à trocar o termo n por $n - 1$ nesta relação; mais do que isso, ele afirma ser possível uma tal melhora. Entretanto, não há neste trabalho qualquer tentativa de se demonstrar esse resultado. Em [23], os autores avaliam que a melhora do bound (2.5.3) pode ser um pouco mais sutil do que a proposta em [8] bastando, para k fixado, substituir n por $n - \delta_{n,k}$, onde $\delta_{n,k} = (k - n + 1)/k$ sempre que $n \leq k$, mantendo inalterado o bound para sistemas com $n \geq k + 1$ partículas. Isso significa que se $k = 3$, o termo $n = 3$ deve ter uma melhora na energia $U(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ que consiste em substituir 3 por $3 - 1/3 = 8/3$. Analogamente, o termo $n = 2$ não precisa ser melhorado neste caso visto que $\delta_{2,3} = 0$. Vamos rapidamente argumentar o porque esperamos que esta

melhora de fato seja necessária, através de um exemplo. Consideremos então o termo $\tilde{a}_3(t)$ e vamos repetir a estimativa feita em (3.6.4) para $k = 3$. Note que, neste caso, a desigualdade $\tilde{a}_2(t) \leq \tilde{C}_2(t)$ permanece válida, manifestando que de fato não precisaremos melhorar (2.5.3) se $n = 2$, o que pode ser verificado explicitamente da mesma forma como procedemos em (3.5.38), embora não o faremos aqui. Portanto, lembrando que $\tilde{C}_3 = f_3^2(t)\tilde{C}_n^{(3)}(t)$, podemos substituir $k = 3$ em (3.2.1), de forma que

$$\tilde{C}_3(t) = f_3^2(t)\tilde{C}_3^{(3)}(t) = \frac{3}{2} \left[\int_{t_0}^t \Gamma(s) e^{\frac{4}{3} \int_s^t B(s') ds'} ds \right]^2. \quad (3.6.5)$$

Agora, paralelamente à (3.6.3), podemos escrever

$$a_3(t) \leq \frac{3}{2} \int_{t_0}^t \Gamma(s) e^{3 \int_s^t B(s') ds'} \left[\Gamma(\bar{s}) e^{\frac{4}{3} \int_{\bar{s}}^s B(s') ds'} d\bar{s} \right] ds. \quad (3.6.6)$$

Note que, em (3.6.4), o truque foi escrever o termo $e^{3 \int_s^t B(s') ds'} = e^{\frac{3}{2} \int_s^t B(s') ds'} e^{\frac{3}{2} \int_s^t B(s') ds'}$, o que nos permitiu unir as integrais de dentro e de fora dos colchetes em (3.6.3). Entretanto, em (3.6.6), o termo 3 na exponencial fora dos colchetes se manteve, assim como em (3.6.3), enquanto que o termo 3/2 nesta última relação foi substituído por um 4/3 em (3.6.6). Essa é a razão da necessidade de se melhorar o bound de energia, conforme discutido acima. Com efeito

$$\begin{aligned} a_3(t) &\leq \frac{3}{2} \int_{t_0}^t \Gamma(s) e^{\frac{5}{3} \int_s^t B(s') ds'} e^{\frac{4}{3} \int_s^t B(s') ds'} \left[\int_{t_0}^t \Gamma(\bar{s}) e^{\frac{4}{3} \int_{\bar{s}}^s B(s') ds'} d\bar{s} \right] ds \\ &= a_3(t) \leq \frac{3}{2} \int_{t_0}^t \Gamma(s) e^{\frac{5}{3} \int_s^t B(s') ds'} \left[\int_{t_0}^t \Gamma(\bar{s}) e^{\frac{4}{3} \int_{\bar{s}}^s B(s') ds'} d\bar{s} \right] ds. \end{aligned} \quad (3.6.7)$$

Agora, como $e^{\frac{4}{3} \int_s^t B(s') ds'} \leq e^{\frac{5}{3} \int_s^t B(s') ds'}$, não podemos concluir que $\tilde{a}_3(t) \leq \tilde{C}_3(t)$ por (3.6.7). Note ainda que se o fator 5/3 em (3.6.7) fosse um fator 4/3, poderíamos concluir a desigualdade mencionada. Além disso, esse fator 5/3 veio exatamente da exponencial $e^{3 \int_s^t B(s') ds'}$ que utiliza o bound de energia (2.5.3). Portanto, uma melhora de 5/3 para 4/3 é necessária, o que equivale exatamente a melhorar o bound de energia por um fator 1/3, assim como previsto em [23]. Nossa proposta então é mostrar que para o caso $n = 3$ (sistema de três partículas), podemos de fato melhorar o bound (2.5.3), ou seja, provar que vale a seguinte desigualdade

$$U(\xi_1, \xi_2, \xi_3) \geq -\left(3 - \frac{1}{3}\right) \dot{B}(t) = -2\bar{6} \dot{B}(t) \quad \forall \xi_1, \xi_2, \xi_3 \in \Lambda, \quad (3.6.8)$$

de forma a obter $\tilde{a}_3(t) \leq \tilde{C}_3(t)$. Esse será nosso objetivo na próxima seção.

3.7 O bound de energia para um sistema de três partículas

O objetivo desta seção é demonstrar que (3.6.8) é, de fato, verdadeira. As definições e propriedades das funções $K_n(x)$ e $h(x)$ que serão utilizadas nesta seção podem ser encontradas no apêndice C. Começamos com alguns resultados importantes.

Proposição 3.7.1. *A função $p(x) = x^2 K_0(x) + x K_1(x)$, com $x > 0$, apresenta um máximo global em $x = x_0 = 0.5950(\dots)$, onde $p(x_0) < 1.07$.*

Figura 3.1: Função $x^2 K_0(x) + x K_1(x)$ como função de $x > 0$

Demonstração. A função $p(x)$ encontra-se representada na figura 3.1. Utilizando as identidades (C.13), é fácil concluir que

$$\frac{dp(x)}{dx} = x(K_0(x) - xK_1(x)). \quad (3.7.1)$$

Note que, utilizando a desigualdade da segunda linha de (C.14) com $a = 1/4$, temos

$$x \left(1 + \frac{1}{2x + \frac{1}{2}} \right) < \frac{xK_1(x)}{K_0(x)}. \quad (3.7.2)$$

Agora, vamos fazer a seguinte estimativa

$$x \left(1 + \frac{1}{2x + \frac{1}{2}} \right) \geq 1 \iff 2x^2 - \frac{1}{2}x - \frac{1}{2} \geq 0. \quad (3.7.3)$$

A condição (3.7.3) é satisfeita quando $x \geq (1 + \sqrt{17})/8 \approx 0.64$. Assim, se $x \geq (1 + \sqrt{17})/8$, (3.7.2) implica que (3.7.1) é estritamente negativa, o que torna a função $p(x)$ estritamente decrescente nesse regime. Esse comportamento pode ser visto com clareza na figura 3.7.1 e nos mostra que tudo o que precisamos é obter um ponto de máximo local no intervalo $x \in (0, (1 + \sqrt{17})/8]$. Note ainda que (3.7.3) representa apenas uma estimativa; de fato, a função $p(x)$ tem derivada negativa já antes de $(1 + \sqrt{17})/8$. Agora, a relação (3.7.1) se anula quando

$$K_0(x) = xK_1(x). \quad (3.7.4)$$

A solução de (3.7.4) pode ser obtida numericamente, sendo satisfeita apenas para o valor $x = x_0 = 0.5950(\dots)$. Note que este valor está no intervalo mencionado anteriormente já que é menor que 0.64. Além disso, temos

$$\frac{d^2p(x)}{dx^2} = xK_0(x) - K_1(x), \quad (3.7.5)$$

e satisfaz $x_0K_0(x_0) - K_1(x_0) \approx -0.8511$, o que nos indica que o ponto x_0 é de fato um ponto de máximo. A figura 3.7.1 juntamente com as análises feitas nos permitem afirmar que x_0 é um máximo global. □

Corolário 3.7.1. *A função $g(x) = K_1(x) - 1.07/x$ é monótona crescente para todo $x > 0$.*

Demonstração. Para que $g(x)$ seja monótona crescente é preciso que sua derivada seja sempre não-negativa. Novamente utilizando as relações de derivação (C.13), temos

$$\frac{dg(x)}{dx} = -K_0(x) - \frac{1}{x}K_1(x) + \frac{1.07}{x^2} = \frac{1}{x}(-xK_0(x) - K_1(x) + \frac{1.07}{x}). \quad (3.7.6)$$

Como $x > 0$, a relação (3.7.6) será não-negativa se vale a desigualdade

$$x^2K_0(x) + xK_1(x) \leq 1.07, \quad (3.7.7)$$

e, por conta da Proposição 3.7.1, esta desigualdade sempre se verifica, o que demonstra o resultado. □

3.7.1 Energia Mínima de um sistema de três partículas

Consideremos em $\mathbb{R}^2$ um sistema composto de três partículas que interagem via Yukawa. Como estamos interessados em mostrar a validade da desigualdade (3.6.8), precisamos minimizar a energia desse sistema,

considerando-se todas as configurações das três partículas. Consideremos então, sem perda de generalidade, um sistema de três partículas conforme ilustrado na figura 3.7.2.

Figura 3.2: Sistema de três cargas no plano. Cores distintas representam cargas distintas.

Na figura 3.7.2 estamos considerando que as duas cargas Q_2 e Q_3 da base do triângulo possuem cargas iguais e diferentes da carga Q_1 . A distância de Q_1 a Q_2 é r_1 , de Q_1 a Q_3 é r_2 e de Q_2 a Q_3 é r_3 . O potencial de interação entre duas partículas pode ser escrito por (3.3.6), ou de maneira um pouco mais simplificada

$$\dot{v}(t, |x - y|) = -\frac{\beta}{8\pi} \frac{d}{dt} (\ln \kappa(t)) 2h(\sqrt{\kappa(t)}|x - y|) = 2\dot{B}(t)h(\sqrt{\kappa(t)}|x - y|). \quad (3.7.8)$$

Utilizando a notação $|x - y| = r$, podemos escrever a energia do sistema representado pela figura 3.2 da seguinte forma

$$U(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \sum_{1 \leq i, j \leq 3} \sigma_i \sigma_j \dot{v}(t, |x_i - x_j|) = -2\dot{B}(t)h(\sqrt{\kappa(t)}r_1) - 2\dot{B}(t)h(\sqrt{\kappa(t)}r_2) + 2\dot{B}(t)h(\sqrt{\kappa(t)}r_3). \quad (3.7.9)$$

Note que a relação (3.7.9) não depende das escolhas de cargas ± 1 particulares, desde que tenhamos um sistema com duas cargas iguais e uma diferente. Além disso, se todas as cargas fossem iguais, poderíamos escrever, por conta da positividade das funções $h(x)$

$$\begin{aligned} U(\xi_1, \xi_2, \xi_3) &= -2\dot{B}(t)h(\sqrt{\kappa(t)}r_1) - 2\dot{B}(t)h(\sqrt{\kappa(t)}r_2) + 2\dot{B}(t)h(\sqrt{\kappa(t)}r_3) \\ &\leq 2\dot{B}(t)h(\sqrt{\kappa(t)}r_1) + 2\dot{B}(t)h(\sqrt{\kappa(t)}r_2) + 2\dot{B}(t)h(\sqrt{\kappa(t)}r_3), \end{aligned} \quad (3.7.10)$$

e, portanto, para avaliar o mínimo de $U(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ basta que analisemos uma configuração com duas cargas iguais e uma diferente.

É conveniente considerar não três variáveis distância como na figura 3.2 mas sim duas variáveis distância e um ângulo θ escolhido. Escolhemos então θ o ângulo formado entre os lados r_1 e r_2 da figura 3.2. Com a lei dos cossenos, podemos escrever

$$r_3 = \sqrt{(r_1 - r_2)^2 + 4r_1r_2 \sin^2(\theta/2)}, \quad (3.7.11)$$

de forma que podemos reescrever (3.7.9) da seguinte forma

$$U(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = 2\dot{B}(t)(h(\sqrt{\kappa(t)}\sqrt{(r_1 - r_2)^2 + 4r_1r_2 \sin^2(\theta/2)}) - h(\sqrt{\kappa(t)}r_1) - h(\sqrt{\kappa(t)}r_2)). \quad (3.7.12)$$

Como $h(x)$ é monótona decrescente, podemos ver que a relação (3.7.12) atingirá seu mínimo em θ em θ máximo, isto é, $\theta = \pi$. Ou seja, *o valor mínimo de energia de um sistema de três partículas em $\mathbb{R}^2$ que interage via (3.7.8) será atingido quando as três partículas estiverem alinhadas*. Se $\theta = \pi$, a relação (3.7.12) se reduz à relação a seguir

$$U(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = 2\dot{B}(t)(h(\sqrt{\kappa(t)}(r_1 + r_2)) - h(\sqrt{\kappa(t)}r_1) - h(\sqrt{\kappa(t)}r_2)). \quad (3.7.13)$$

Denotando $\sqrt{\kappa(t)}r_1 = x$ e $\sqrt{\kappa(t)}r_2 = y$, reescrevemos (3.7.13) de maneira simplificada

$$U(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = 2\dot{B}(t)(h(x + y) - h(x) - h(y)). \quad (3.7.14)$$

Proposição 3.7.2. *Com a notação acima, vale a desigualdade*

$$U(\xi_1, \xi_2, \xi_3) \geq -2.14\dot{B}(t), \quad (3.7.15)$$

Além disso, (3.7.15) garante que a desigualdade (3.6.8) é verdadeira para todo $\xi_1, \xi_2, \xi_3 \in \Lambda$.

Para demonstrar a Proposição 3.7.2 basta mostrar que vale a desigualdade $h(x + y) - h(x) - h(y) \geq -1.07$. Agora, podemos escrever

$$h(x + y) - h(x) - h(y) \geq -1.07 \iff h(x + y) - 1.07 - (h(x) - 1.07) - (h(y) - 1.07) \geq 0. \quad (3.7.16)$$

Definindo $f(x) = h(x) - 1.07$, vemos também que a condição $h(x + y) - h(x) - h(y) \geq -1.07$ é equivalente à desigualdade

$$f(x + y) \geq f(x) + f(y). \quad (3.7.17)$$

A propriedade (3.7.17) é chamada de *superaditividade*; uma função $f(x)$ que satisfaz a desigualdade (3.7.17) é chamada de *função superaditiva*. Portanto, se provarmos a desigualdade (3.7.17), teremos provado a Proposição 3.7.2. Considere o seguinte resultado

Proposição 3.7.3. *Seja $f = f(x)$ uma função de $x \in (0, \infty)$ a valores reais e considere a função $g(x) = f(x)/x$. Então se $g(x)$ é monótona crescente, $f(x)$ é superaditiva.*

Demonstração. Como $x \neq 0$, a função $g(x)$ está bem definida. Suponhamos que $g(x)$ seja monótona crescente. Então, vale a desigualdade $g(x+y) \geq g(x)$. Portanto, temos

$$f(x+y) = x \frac{f(x+y)}{x+y} + y \frac{f(x+y)}{x+y} = xg(x+y) + yg(x+y) \geq xg(x) + yg(y) = f(x) + f(y). \quad (3.7.18)$$

□

Demonstração. (Proposição 3.7.2) Da relação (C.12) vemos que $h(x) = xK_1(x)$, com $x > 0$. Portanto, $f(x) = h(x) - 1.07 = xK_1(x) - 1.07$. Defina $g(x) = f(x)/x = K_1(x) - 1.07/x$. Pela Proposição 3.7.1, $g(x)$ é monótona crescente e, portanto, pela Proposição 3.7.3, $f(x)$ é superaditiva. Isso demonstra a Proposição 3.7.2.

□

Para finalizar esta seção, é importante mencionar que mesmo o bound da Proposição 3.7.2 pode ser melhorado. De fato, a superfície $2(h(x+y) - h(x) - h(y))$ presente na equação (3.7.14), quando analisada como função de duas variáveis reais positivas x, y , apresenta um mínimo (global) em $x = y = x^* \approx 0.4132$, atingindo nesse ponto um valor $2(h(2x^*) - 2h(x^*)) \approx -2.11$. Note que, conforme a notação introduzida, $x = y$ é equivalente à igualdade $r_1 = r_2$, ou seja, o valor de mínima energia $U(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ de um sistema de três partículas com cargas ± 1 em $\mathbb{R}^2$ cuja interação (aos pares) é dada por (3.7.8) ocorre quando o sistema possui apenas duas cargas iguais, encontra-se alinhado e com as duas cargas iguais equidistantes de sua carga oposta.

3.8 Convergência da Série de Mayer para $16\pi/3 < \beta < 6\pi$

Denotando por $\tilde{C}_n^{(3)}(t)$ a solução da equação diferencial

$$\dot{\tilde{C}}_n^{(3)}(t) = \frac{n\Gamma_3(t)}{2} \sum_{j=1}^{n-1} \tilde{C}_j^{(3)}(t) \tilde{C}_{n-j}^{(3)}(t) \quad \text{com} \quad \tilde{C}_1^{(3)}(t) \equiv 1 \quad \text{e} \quad \tilde{C}_{n \geq 2}^{(3)}(t_0) = 1, \quad (3.8.1)$$

a equação (3.2.9), com $k = 3$, nos leva a concluir (em analogia com os casos $k = 1, 2$)

$$C_n^{(3)}(t) \leq \tilde{C}_n^{(3)}(t) \quad n \geq 4. \quad (3.8.2)$$

Note que a discussão feita na seção 3.4 é válida também para o presente momento; de fato, a majoração (3.8.2) nos fez perder informação à respeito do coeficiente $C_2^{(3)}(t)$ e, agora, também do coeficiente $C_3^{(3)}(t)$. Entretanto, o procedimento da seção 3.4 pode ser estendido também para o caso $k = 3$. Para isso, consideramos um novo multiplicador de Lagrange dado por $L_3(t) \doteq \frac{2}{3}z\theta_z(t, 0) + \frac{1}{6}z^2\theta_{zz}(t, 0)$ e o inserimos novamente na equação (2.5.30), o que nos leva à uma equação similar à equação (3.4.8)

$$\dot{C}_n(t) = \frac{4}{3}(n-1)B(t)C_n(t) + \frac{n\Gamma(t)}{2} \sum_{j=1}^{n-1} C_j(t)C_{n-j}(t). \quad (3.8.3)$$

Novamente, utilizando a mudança de variáveis $zf_3(t) = \omega$, com $f_3(t)$ definido por (3.2.1) com $k = 3$, a equação acima se torna

$$\begin{aligned} \dot{C}_n^{(3)}(t) &= \frac{n\Gamma_3(t)}{2} \sum_{j=1}^{n-1} C_j^{(3)}(t)C_{n-j}^{(3)}(t) \quad \text{se} \quad n \leq 3, \\ \dot{C}_n^{(3)}(t) &= -\left(\frac{n-4}{2}\right)B(t)C_n^{(3)}(t) + \frac{n\Gamma_3(t)}{2} \sum_{j=1}^{n-1} C_j^{(3)}(t)C_{n-j}^{(3)}(t) \quad \text{se} \quad n \geq 4, \end{aligned} \quad (3.8.4)$$

onde, novamente, $C_1^{(3)}(t) \equiv 1$ e $C_n^{(3)}(t_0) = 1$ para todo $n \geq 2$. Note que (3.8.4) regulariza (redefine) os coeficientes $C_2^{(3)}(t)$ e $C_3^{(3)}(t)$, tornando-os tais que satisfaçam $C_2^{(3)}(t) = \tilde{C}_2^{(3)}(t)$ e $C_3^{(3)}(t) = \tilde{C}_3^{(3)}(t)$, e mantém os demais coeficientes inalterados, mantendo então a validade da desigualdade (3.8.2). Sejam $\tilde{a}_2(t)$ a versão regularizada de $a_2(t)$ e, para $n \geq 2$, $\tilde{a}_n(t)$ a versão dos coeficientes $a_n(t)$ com termo $a_2(t)$ substituído (nas equações de recorrência) por $\tilde{a}_2(t)$. Antes de serem regularizados, as desigualdades (3.2.16) e (3.8.2) implicam nas relações a seguir para $a_n(t)$

$$nb_{\Lambda,n} \leq \frac{1}{(n-1)!}a_n(t) \leq f_3^{n-1}(t)C_n(t) \leq f_3^{n-1}(t)\tilde{C}_n^{(3)}(t), \quad \forall n \geq 4 \quad t \in [t_0, t] \quad (3.8.5)$$

mas, quando removemos o *cutoff*, precisamos analisar se as desigualdades acima se mantêm válidas. Definindo $\tilde{C}_n(t) = f_3^{n-1}(t)\tilde{C}_n^{(3)}(t)$, esses coeficientes serão finitos dados que o limite $t \rightarrow -\infty$ satisfaça a condição a seguir

$$\begin{aligned} \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \int_{t_0}^0 \frac{d\kappa(s)}{ds} \frac{1}{\kappa^2(s)} \exp\left(\frac{4}{3} \int_s^0 \frac{\beta}{8\pi} \frac{d}{ds'} (-\ln \kappa(s')) ds'\right) ds &= \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \int_{t_0}^0 -\frac{d\kappa(s)}{ds} \frac{1}{\kappa^2(s)} \kappa^{\frac{\beta}{6\pi}}(s) ds \\ &= \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \frac{6\pi}{6\pi - \beta} \kappa^{\frac{\beta}{6\pi} - 1}(s) \Big|_{t_0}^0 \\ &= \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \frac{6\pi}{6\pi - \beta} (1 - \kappa^{\frac{\beta}{6\pi} - 1}(t_0)) < \infty, \end{aligned} \quad (3.8.6)$$

o que é sempre satisfeito dado que $\beta < 6\pi$. Entretanto, lembramos que se $\beta \in (4\pi, 6\pi)$, o coeficiente $a_2(t)$ apresenta divergência, o que é propagado, para $n \geq 3$, pelas inequações que definem recursivamente os coeficientes $a_n(t)$. Felizmente, conforme mencionado anteriormente, a regularização de $a_2(t)$ da seção 3.5 é válida para $\beta < 6\pi$ e portanto o coeficiente $\tilde{a}_2(t)$ desta seção pode ser reutilizado neste momento. Além disso, pode ser demonstrado (embora não o faremos aqui) que ainda vale a desigualdade $\tilde{a}_2(t) \leq \tilde{C}_2(t)$, mesmo quando o *cutoff* for removido. A finitude de ambos os termos $\tilde{a}_2(t)$ e $\tilde{C}_2(t)$ também é propagada pelas equações de recorrência que definem esses coeficientes, de forma que regularizar $a_2(t)$ novamente garante a finitude de todos os coeficientes $\tilde{a}_{n \geq 3}(t)$ e $\tilde{C}_{n \geq 3}(t)$. Por fim, a Proposição 3.7.2 garante que (3.6.7) implique na desigualdade $\tilde{a}_3(t) \leq \tilde{C}_3(t)$. Portanto, podemos incluir os termos $n = 2$ e $n = 3$ em (3.8.2), de onde podemos concluir que fica demonstrada a convergência da série de Mayer para o gás de Yukawa para $\beta < 6\pi$ para valores de z satisfazendo a condição

$$e|z|\tau_3(0) < 1 \quad \text{onde} \quad \tau_3(0) \doteq \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \int_{t_0}^0 \Gamma(s) \exp\left(\frac{4}{3} \int_s^0 B(s') ds'\right) ds. \quad (3.8.7)$$

Capítulo 4

Discussões Finais e Conclusões

Como pudemos ver, a convergência da série de Mayer de um gás de Yukawa em $\mathbb{R}^2$ para altas temperaturas pode apresentar diversos ingredientes desafiadores à nossa compreensão e, por isso, ainda é um problema não-resolvido em mecânica estatística rigorosa. O formalismo do capítulo 1, embora introduza as ideias e a formulação do problema, apresenta diversas limitações e, embora também limitado, o modelo algébrico introduzido por Brydges e utilizado neste trabalho, que nos leva à equação diferencial do majorante, nos mostra ser mais simples, além de nos proporcionar trabalhar de maneira contínua com infinitas escalas de decomposição do potencial de Yukawa, conforme discutido na seção 2.3.

Uma vez regularizado o potencial de Yukawa, ao incorporarmos o formalismo algébrico na teoria introduzida no primeiro capítulo, fomos capazes de desenvolver um sistema de equações diferenciais para as funções de Ursell $\psi_n^c(t, \vec{\xi})$ e essas equações, uma vez majoradas, nos levam à um majorante natural para os coeficientes de Mayer $b_{n,\Lambda}$, conforme discutido na seção 2.5. Embora a série de Mayer represente uma série de potências em z para a pressão, uma vez que a densidade do sistema se relaciona com a pressão por meio de uma derivada com respeito à atividade z , uma série de potências em z para a densidade pode ser obtida diretamente da série de Mayer. O uso da série de potências para a densidade não apresenta perda de generalidade, uma vez que os raios de convergência das duas séries são iguais; entretanto, o majorante da densidade é mais fácil de ser estudado e por isso desenvolvemos nosso método majorante em termos da densidade do sistema.

O estudo da convergência da série de Mayer para $\beta < 4\pi$ e $\beta < 16\pi/3$ se resumem, respectivamente, ao

estudo da equação diferencial (3.2.9) para valores de $k = 1$ e $k = 2$, bem como essa equação se relaciona com a desigualdade (3.2.16). Vimos que se $k = 1$, uma simples majoração de (3.2.9) nos leva à convergência da série para $\beta < 4\pi$ no regime $e|z|\tau < 1$, onde τ é dado por (3.2.19). Vimos também que para $k = 2$, a conjectura de BGN se manifesta na divergência do coeficiente $a_2(t)$ que majora $b_{2,\Lambda}$. Com isso, é preciso regularizar não apenas $a_2(t)$ mas também o coeficiente dele derivado, $C_2(t)$. Essas regularizações, embora independentes, se conectam ao manter a desigualdade (3.5.38) mesmo quando o *cutoff* é removido, sendo válidas apenas no regime $\beta < 6\pi$. Isso garante a convergência da série para $\beta < 16\pi/3$ no regime $e|z|\tau_2$ onde τ_2 é dado por (3.4.4), o que conclui os resultados presentes nos trabalhos de Brydges e no trabalho de Guidi e Marchetti, a respeito da convergência da série de Mayer para um gás de Yukawa para $\beta < 4\pi$ e $\beta < 16\pi/3$.

A Proposição 3.7.2 garante que podemos melhorar o bound de estabilidade (2.5.3) para um sistema de três partículas que interage via potencial de Yukawa em $\mathbb{R}^2$ e essa mudança é suficiente, como vimos, para garantir a convergência da série de Mayer desse gás (com termo de ordem z^2 omitido) para $\beta < 6\pi$, como é proposto em [23], no raio de convergência (3.8.7). De fato, trocamos o fator $n = 3$ do bound inicial pelo valor 2.14 que é suficiente para demonstrar essa convergência, já que precisávamos apenas de uma melhora $n = 3$ para $n = 8/3$, como discutido na seção 3.6.

No final da seção 3.7, mencionamos que o bound da Proposição 3.7.2 poderia também ser melhorado. Na verdade, Guidi e Marchetti já haviam chamado atenção para esse fato em [23], onde foram calculados numericamente alguns valores mínimos da função $U_n(\vec{\xi})$ para sistemas formados por três, quatro e cinco partículas. Entretanto, demonstrar analiticamente que a energia de um sistema de três partículas possui um mínimo global em $-2.11(\dots)$ não é tarefa fácil e por conta disso a Proposição 3.7.2, embora não represente o melhor bound possível para $U(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$, já é suficiente para demonstrar a convergência no regime $\beta < 6\pi$. Além disso, as diferenças entre o bound proposto pela Proposição 3.7.2 e o bound original da função $U(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ diferem em aproximadamente 0.03, sendo portanto bastante próximos.

Também vimos que a Proposição 3.7.2 nos permite ir além dos resultados encontrados em [23] e [8], que garantem apenas a convergência para $\beta < 16\pi/3$. Além disso, como o mínimo bound para três partículas é atingido em $-2.11(\dots)\dot{B}(t)$, a condição de substituir n por $n - 1$ em (2.5.3) proposta em [8] não deve ser satisfeita, embora não seja necessária para demonstrar a convergência da série para $\beta < 6\pi$ como afirma Brydges neste trabalho.

Embora fomos capazes de estender os resultados de [8] neste trabalho, o estudo da série de Mayer para $\beta > 6\pi$ apresentará algumas dificuldades. Primeiramente, segundo a conjectura BGN, se $\beta \in (6\pi, 20\pi/3)$ passaremos a ter a divergência do coeficiente $a_4(t)$ e, adicionalmente, voltaremos a ter a divergência do coeficiente $a_2(t)$, já que a regularização apresentada neste trabalho só pode ser aplicada ao regime $\beta < 6\pi$, como discutido anteriormente. Portanto, teremos que encontrar uma forma regularizar ambos os coeficientes, o que talvez possa ser feito adaptando-se o método da seção 3.5, embora ainda não tenhamos uma perspectiva clara sobre esse procedimento. Contudo, a maior dificuldade que será enfrentada ao se estudar valores $\beta > 6\pi$ possivelmente diz respeito à melhora do bound (2.5.3) para valores suficientemente grandes de k . Para ver como essa dificuldade surge, considere a melhora proposta por [23] que consiste em trocar n por $n - \delta_{n,k}$, ou seja

$$n - \delta_{n,k} = n - \frac{k - n + 1}{k} = \left(\frac{k + 1}{k} \right) (n - 1). \quad (4.0.1)$$

No limite $k \rightarrow \infty$, o termo $(k + 1)/k \rightarrow 1$ e a melhora de (2.5.3) deverá ser $n - 1$, para k suficientemente grande, que coincide com a melhora proposta por Brydges. Em outras palavras, para valores pequenos de k , a troca n por $n - 1$ no bound de energia proposto em [8] não é necessária e podemos ultrapassar o regime $\beta = 16\pi/3$ sem essa condição; entretanto, essa melhora garantiria (a menos das regularizações dos coeficientes $a_{2n}(t)$ divergences) a possibilidade de estudar o comportamento da série de Mayer para temperaturas que chegam a 8π . Mas, como já vimos, mesmo para um caso simples de um sistema de três partículas, esse bound *não pode ser alcançado* e encontramos assim um claro obstáculo de como estender nosso estudo para temperaturas que alcancem 8π , obstáculo esse que ainda não sabemos contornar. Entretanto, a análise detalhada da função (3.7.14) nos parece mostrar que dois caminhos possíveis seriam (1) através da mudança da forma como a função de escala $\kappa(t)$ é utilizada para regularizar o potencial de Yukawa ou (2) através da mudança das normas definidas sobre esses potenciais.

Neste trabalho pudemos estender da convergência da série de Mayer para o gás de Yukawa bidimensional para $\beta < 6\pi$, o que não havia sido feito em [8] e [23]. Entretanto, nossas análises nos permitem induzir que o estudo dessa série no regime $\beta \in (6\pi, 8\pi)$ apresenta algumas dificuldades consideráveis que deverão ser contornadas como a nova divergência do coeficiente $a_2(t)$ juntamente com os próximos coeficientes pares (conforme a conjectura BGN) e a melhora no bound (2.5.3) que, a princípio, não poderá ser alcançada para k suficientemente grande.

Apêndice A

Medidas Gaussianas

Denotemos por $\mathbb{B}_{\mathbb{R}}$ a σ -álgebra de Borel em $\mathbb{R}$. Lembramos que uma medida de probabilidade μ em $\mathbb{R}$ é apenas uma medida (ver [1]) satisfazendo $\mu(\mathbb{R}) = 1$. As definições abaixo são discutidas com detalhes em [5]. Assumiremos que o leitor tenha conhecimentos básicos a respeito de teoria de probabilidade; do contrário, boas referências são [4] e [37]. Como mencionado na seção 2.4, não faremos aqui nenhuma discussão à respeito da *existência* de medidas gaussianas; o leitor interessado pode encontrar discussões interessantes à esse respeito em [18].

Definição A.1. *Uma medida de probabilidade μ em $\mathbb{B}_{\mathbb{R}}$ é dita ser gaussiana se é uma medida de Dirac δ_a , isto é*

$$\delta_a \doteq \begin{cases} 1 & \text{se } x = a \\ 0 & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

ou se é uma medida que possui densidade $f(x, m, \sigma)$ dada por

$$f(x, m, \sigma) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-m)^2}{2\sigma^2}\right), \quad (\text{A.2})$$

com respeito à medida de Lebesgue em $\mathbb{R}$. No último caso, a medida é chamada de não-degenerada. Os parâmetros m e σ^2 são chamados, respectivamente, de média e variância.

■

A próxima definição estende a definição A.0.1 para *espaços localmente convexos* (ver [33], [25]). Para

isso, considere X um espaço vetorial normado e X^* seu espaço dual. Denotamos por $\mathcal{E}(X)$ a σ -álgebra gerada por X^* , isto é, a menor σ -álgebra que contém X^* .

Definição A.2. *Seja X um espaço localmente convexo, com topologia induzida pela sua norma. Uma medida de probabilidade μ sobre $\mathcal{E}(X)$ é chamada gaussiana se, para toda função $f \in X^*$, a medida induzida $\mu \circ f^{-1}$ em $\mathbb{R}$ é gaussiana.*

■

Apêndice B

Comentários sobre o formalismo Algébrico

Reservamos esse espaço para alguns comentários e definições que complementam o formalismo algébrico introduzido na seção 2.2 e utilizado em todo restante do trabalho. Em primeiro lugar, é interessante registrar a definição formal de uma álgebra no contexto apresentado.

Definição B.1. (*Álgebra*) *Seja $\mathcal{A}$ um espaço vetorial sobre $\mathbb{C}$. O espaço $\mathcal{A}$ é dito ser uma álgebra se $\mathcal{A}$ é equipado por uma lei de multiplicação que associa, a cada par de elementos $A, B \in \mathcal{A}$, um elemento $AB \in \mathcal{A}$. Além disso, o produto é assumido ser associativo e distributivo, isto é, satisfazem as seguintes propriedades:*

1. $A(BC) = (AB)C$
2. $A(B+C) = AB + AC$
3. $\alpha\beta(AB) = (\alpha A)(\beta B)$

Para quaisquer $A, B, C \in \mathcal{A}$ e $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$. Uma álgebra é dita ser comutativa se seu produto é comutativo, isto é, se para quaisquer $A, B \in \mathcal{A}$ vale a igualdade

$$AB = BA.$$

■

Com isso, demonstramos a validade do seguinte resultado.

Proposição B.1. *Com produto definido por (2.2.3), $\mathcal{G}$ introduzida na definição 2.2.1 é uma álgebra comutativa.*

Demonstração. Já sabemos que $\mathcal{G}$ é um espaço vetorial com as operações (2.2.1) e (2.2.2). Suponhamos $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ e $\psi, \phi, \zeta \in \mathcal{G}$. Precisamos mostrar que $\mathcal{G}$ satisfaz as propriedades 1 a 3 da definição 2.2.1. Vemos que a propriedade 3 é satisfeita, uma vez que

$$\begin{aligned} \alpha\beta(\psi \circ \phi) &= \alpha\beta \sum_{I \subset \{1, \dots, n\}} \psi(P_I \vec{\xi}) \phi(P_{I^c} \vec{\xi}) \\ &= \sum_{I \subset \{1, \dots, n\}} \alpha\psi(P_I \vec{\xi}) \beta\phi(P_{I^c} \vec{\xi}) = (\alpha\psi)(\beta\phi). \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

Analogamente, a propriedade 2 é satisfeita

$$\begin{aligned} \psi \circ (\phi + \zeta) &= \sum_{I \subset \{1, \dots, n\}} \psi(P_I \vec{\xi}) (\phi + \zeta)(P_{I^c} \vec{\xi}) \\ &= \sum_{I \subset \{1, \dots, n\}} \psi(P_I \vec{\xi}) \phi(P_{I^c} \vec{\xi}) + \sum_{I \subset \{1, \dots, n\}} \psi(P_I \vec{\xi}) \zeta(P_{I^c} \vec{\xi}) = \psi \circ \phi + \psi \circ \zeta. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

A propriedade 1 segue então

$$\begin{aligned} \psi \circ (\phi \circ \zeta) &= \sum_{J \subset \{1, \dots, n\}} \psi(P_J \vec{\xi}) \left(\sum_{I \subset J^c} \phi(P_I \vec{\xi}) \zeta(P_{I^c} \vec{\xi}) \right) \\ &= \sum_{J \subset \{1, \dots, n\}} \left(\sum_{I \subset J^c} \psi(P_I \vec{\xi}) \phi(P_{I^c} \vec{\xi}) \right) \zeta(P_J \vec{\xi}) = (\psi \circ \phi) \circ \zeta. \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Por fim, note que o produto (2.2.3) é simétrico com relação a I e I^c de forma que a álgebra é comutativa. $\square$

Se utilizarmos as notações (2.2.7) e (2.2.8) juntamente com a proposição anterior, vamos estar aptos a concluir que alguns resultados conhecidos de expansões em Taylor de funções reais e de álgebra poderão ser reproduzidos no contexto da seção 2.5 de maneira análoga. Por exemplo, deverá valer a expansão binomial para sequências $\phi, \psi \in \mathcal{G}$

$$(\phi + \psi)^n = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} \phi^k \circ \psi^{n-k}. \quad (\text{B.4})$$

Além disso, utilizando-se da mesma demonstração para o caso real, o seguinte resultado pode ser obtido sem grande dificuldade:

Proposição B.2. *Com a notação acima, são válidas as seguintes afirmações:*

1. *Se $\phi \in \mathcal{G}$ então $\mathbf{1} \circ \phi = \phi$*

2. *Se $k \in \mathbb{N}$ e $\phi \in \mathcal{G}_0$ então valem as seguintes propriedades:*

$$(2.1) \quad \mathcal{Exp}(\phi)^k = \mathcal{Exp}(k\phi)$$

$$(2.2) \quad \mathcal{Exp}(\phi + \psi) = \mathcal{Exp}(\phi) \circ \mathcal{Exp}(\psi)$$

$$(2.3) \quad \mathcal{Exp}(\mathcal{Ln}(\mathbf{1} + \phi)) = \mathcal{Ln}(\mathcal{Exp}(\phi)) = \phi$$

As observações acima tem apenas o objetivo de justificar algumas das passagens que foram utilizadas durante o texto sem que houvesse uma discussão à respeito de sua validade. A relação (B.4) e a Proposição B.2 não serão demonstradas, já que seguem os mesmos passos das demonstrações para o caso real.

Apêndice C

Notações e Funções Especiais

Conforme discutido em [19] e [23], uma maneira de simplificar as integrais (2.3.1) e (2.3.8) buscando a demonstração de resultados tais como a Proposição 2.3.2 é utilizar, nestas últimas relações, a fórmula integral de Cauchy do cálculo complexo. Por conta disso, é interessante considerar, nesses casos, uma função auxiliar $g = g(\omega)$ definida pela seguinte integral

$$g(\omega) \doteq \int_0^\infty \frac{e^{-\omega\sqrt{k^2+1}}}{\sqrt{k^2+1}} dk. \quad (\text{C.1})$$

Em (C.1), fazemos a seguinte troca de variáveis

$$\omega\sqrt{k^2+1} = \varsigma \Rightarrow \begin{cases} k = \frac{1}{\omega}\sqrt{\varsigma^2 - \omega^2} \\ dk = \frac{1}{\omega} \frac{\varsigma}{\sqrt{\varsigma^2 - \omega^2}} d\varsigma, \end{cases} \quad (\text{C.2})$$

e considerando $\omega = \omega(t)$, obtemos

$$\frac{d}{dt}(g \circ \omega)(t) = \frac{d\omega}{dt} \int_0^\infty e^{-\omega\sqrt{k^2+1}} dk = \frac{d\omega}{dt} \frac{1}{\omega} \int_\omega^\infty \frac{e^{-\varsigma}}{\sqrt{\varsigma^2 - \omega^2}} \varsigma d\varsigma \doteq \frac{d\omega}{dt} \frac{1}{\omega} h(\omega). \quad (\text{C.3})$$

Um fato trivial, mas que vale a pena ser mencionado, é a identidade a seguir

$$h(0) = \int_0^\infty e^{-\varsigma} d\varsigma = 1. \quad (\text{C.4})$$

Além disso, utilizando integração por partes, podemos obter as relações

$$\begin{aligned} \int_0^\infty g(\omega)\omega d\omega &= \int_0^\infty \frac{1}{(k^2+1)^{\frac{3}{2}}} dk = 1 \\ \int_0^\infty \omega h(\omega) d\omega &= \int_0^\infty \omega^2 g'(\omega) d\omega = 2 \int_0^\infty \omega g(\omega) d\omega = 2, \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

com $g'(\omega)$ denotando a derivada de g com respeito à ω .

Alternativamente, o potencial (2.3.1) é solução da equação diferencial¹

$$\Delta v(x_1, x_2) = \mu^2 v(x_1, x_2), \quad (\text{C.6})$$

com constante $\mu \equiv 1$ e condições de contorno adequadas. Portanto, v possui uma forma explícita

$$v(x_1, x_2) = \frac{1}{2\pi} K_0(|x_1 - x_2|) \equiv \frac{1}{2\pi} K_0(|x|), \quad (\text{C.7})$$

onde $K_0(x)$ denota a chamada de *função de Bessel generalizada de segunda espécie e ordem 0*. As funções de Bessel de segunda espécie com ordens 0, 1 e 2 e x não-negativo estão esboçadas na figura C.1. Denotaremos aqui por $K_n(x)$ as funções de Bessel modificadas de segunda espécie e ordem $n \in \mathbb{Z}$, onde $K_{-n}(x) = -K_n(x)$ se $n \in \mathbb{N}$. Vale mencionar que estaremos sempre considerando o domínio das funções $K_n(x)$ como sendo $x \in (0, \infty)$.

Figura C.1: Funções de Bessel de segunda espécie de ordens 0, 1 e 2

Como podemos ver, as funções $K_n(x)$ não são limitadas superiormente. Além disso, $K_0(x)$ cresce indefinidamente perto da origem, caracterizando a não-regularidade na origem do potencial de Yukawa;

¹Note que o potencial v solução da equação diferencial (C.6) difere do potencial (2.3.1) por um fator β .

de fato, $K_0(x) \approx \ln x^{-1}$ no limite em que $x \rightarrow 0^+$, como discutido em [12]. É fácil ver que, por conta de (C.7), o potencial regularizado (2.3.8) pode ser escrito como (c.f. [19])

$$v(t, |x|) = \frac{\beta}{2\pi} K_0(\sqrt{\kappa(t)}|x|), \quad (\text{C.8})$$

como $K_0(t, \cdot)$ é diferenciável, a derivada do potencial (C.8) é dada por

$$\frac{\partial v(t, |x|)}{\partial t} = \frac{\beta}{4\pi} \frac{d\kappa(t)}{dt} \frac{1}{\sqrt{\kappa(t)}} |x| K'_0(\sqrt{\kappa(t)}|x|), \quad (\text{C.9})$$

onde $K'_0(t, \cdot)$ denota a derivada de $K_0(t, \cdot)$ com respeito à t .

A conexão entre o formalismo das equações (C.1) à (C.5) e o formalismo das equações (C.7) à (C.9) é imediata, já que ambos representam formas distintas de se avaliar a equação diferencial (C.6). Na verdade, vale a identidade

$$K_0(x) \equiv g(x), \quad (\text{C.10})$$

de forma que (C.8) também se escreve como

$$v(t, |x|) = \frac{\beta}{2\pi} g(\sqrt{\kappa(t)}|x|). \quad (\text{C.11})$$

Analogamente, vale a identidade

$$h(x) \equiv xK_1(x). \quad (\text{C.12})$$

O gráfico da figura C.2 ilustra o comportamento da função $h(x)$.

As funções $K_n(x)$ são diferenciáveis e satisfazem as relações abaixo (c.f [16])

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx}(x^n K_n(x)) &= -x^n K_{n-1}(x) \\ \frac{d}{dx}(K_n(x)) &= -\frac{1}{2}(K_{n+1}(x) + K_{n-1}(x)) \\ \frac{d}{dx}(K_n(x)) &= -K_{n-1}(x) - \frac{n}{x}K_n(x). \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$

Note que as relações acima são válidas para $n \in \mathbb{Z}$. Além disso, como podemos ver em [41] e [16], valem as seguintes estimativas

$$\begin{aligned} \frac{\sqrt{\pi}e^{-x}}{\sqrt{2(x+a)}} < K_0(x) < \frac{\sqrt{\pi}e^{-x}}{\sqrt{2x}} \quad x > 0 \iff a \geq \frac{1}{4} \\ 1 + \frac{1}{2(x+a)} < \frac{K_1(x)}{K_0(x)} < 1 + \frac{1}{2x} \iff a \geq \frac{1}{4}. \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

Figura C.2: Função $h(x)$

As últimas identidades nos permitem avaliar as integrais abaixo

$$\int_0^\infty x h'(x) dx = -\frac{1}{2} \int_0^\infty (x K_0(x) + x K_2(x)) dx = \frac{\pi}{2}, \quad (\text{C.15})$$

$$\int_0^\infty x^2 h(x) dx = \int_0^\infty x^3 K_1(x) dx = \frac{3\pi}{2}, \quad (\text{C.16})$$

Por fim, note que (C.1), (C.3) e (C.9) nos levam naturalmente à representação

$$\frac{\partial v(t, |x|)}{\partial t} = -\frac{\beta}{4\pi} \frac{d\kappa(t)}{dt} \frac{1}{\sqrt{\kappa(t)}} h(\sqrt{\kappa(t)} |x|). \quad (\text{C.17})$$

Apêndice D

Introdução à Teoria de Distribuições e Derivadas Funcionais

A discussão presente nesta seção está fundamentada e melhor discutida em [24] e em [13]. Alguns resultados relacionados à teoria de distribuição também podem ser encontrados em [17] e [32]. Durante toda esta seção, $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ é um conjunto aberto não-vazio. Além disso, definimos o seguinte conjunto

$$C(\Omega) \doteq \{f : \Omega \rightarrow \mathbb{C}, f \text{ é contínua em } \Omega\}, \quad (\text{D.1})$$

e analogamente

$$C^\infty(\Omega) \doteq \{f : \Omega \rightarrow \mathbb{C}, f \text{ é infinitamente diferenciável em } \Omega\}. \quad (\text{D.2})$$

Começamos com uma definição bastante importante em teoria de distribuição:

Definição D.1. (*Suporte*) *Seja $f \in C(\Omega)$. O conjunto*

$$\text{supp}(f) \doteq \overline{\{x \in \Omega, f(x) \neq 0\}} \quad (\text{D.3})$$

é chamado de suporte de f .

■

Podemos agora definir as chamadas *funções teste*, como se segue.

Definição D.2. (*Função Teste, Espaço das Funções Teste*) Uma função teste f é uma função $f \in C^\infty(\Omega)$ cujo suporte é compacto. Além disso, o conjunto

$$D(\Omega) \doteq \{f \in C^\infty(\Omega), \text{supp}(f) \text{ é compacto}\} \quad (\text{D.4})$$

é chamado de *espaço das funções teste* em Ω . ■

Note que, como $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ tem dimensão finita, e como o conjunto $\text{supp}(f)$ é fechado por definição, então $\text{supp}(f)$ será compacto se, e somente se for limitado. Note que $D(\Omega)$ é chamado de *espaço* pois, munido das operações tradicionais de soma e multiplicação por escalar de funções em $C^\infty(\Omega)$, formam um espaço vetorial sobre $\mathbb{R}$ ou $\mathbb{C}$.

Definição D.3. (*Espaços* $D^k(K)$) Seja $C_c^k(\Omega)$ o conjunto das funções $f : \Omega \rightarrow \mathbb{C}$ de suporte compacto e k vezes diferenciável¹, $k \in \mathbb{N}$. Definimos o conjunto

$$D^k(K) \doteq \{f \in C_c^k(\Omega), \text{supp}(f) \subset K \subset \Omega\}, \quad (\text{D.5})$$

onde K é um conjunto compacto fixado. Por fim, $D(K) \doteq D^\infty(K) \equiv \bigcap_{k=1}^\infty D^k(K)$. ■

Em $D^k(K)$ podemos definir uma norma. Com efeito, se $f \in D^k(K)$

$$\|f\| \doteq \max_{x \in K} \sum_{|\alpha| \leq k} \|\partial^\alpha f(x)\|_{L^\infty(K)}, \quad (\text{D.6})$$

onde $\|\cdot\|_{L^\infty(K)}$ denota a norma em L^∞ restrita ao conjunto K e ainda

$$\partial^{|\alpha|} f \doteq \frac{\partial^{|\alpha|} f}{\partial_{x_1}^{\alpha_1} \dots \partial_{x_n}^{\alpha_n}} \quad \alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n), \quad (\text{D.7})$$

com $|\alpha|$ representando a norma euclidiana do vetor $(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ e ∂_{x_j} a derivada parcial com respeito à variável x_j . Conforme mencionado em [24], $D(\Omega)$ é um limite estritamente indutivo dos espaços $D(K)$ definidos acima, onde K percorre uma sequência exaustiva de compactos de $\mathbb{R}^n$.

¹Note que $D(\Omega) \equiv C_c^\infty(\Omega)$.

O espaço $D(\Omega)$ possui propriedades bastante importantes relacionados à sua topologia, como, por exemplo, ser um espaço *localmente convexo* (ver [33]). Para não entrarmos em detalhes técnicos à respeito da topologia de $D(\Omega)$, vamos definir a noção de convergência nesse espaço e, através dessa noção, introduzir a noção de funcional limitado nesse espaço sem mencionar quaisquer ideias de norma ou topologia.

Definição D.4. (Convergência de Funções em $D(\Omega)$) Seja $(\phi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ uma sequência de funções em $D(\Omega)$ e $\phi \in D(\Omega)$. Dizemos que $\phi_n \rightarrow \phi$ em $D(\Omega)$ quando $n \rightarrow \infty$ se:

1. Existe $K \subset \Omega$ compacto tal que $\text{supp}(\phi_n) \subset K$ para todo $n \in \mathbb{N}$ e $\text{supp}(\phi) \subset K$;
2. $\phi_n \rightarrow \phi$ uniformemente em K

■

Chegamos então à definição central desta seção:

Definição D.5. (Distribuição) Uma distribuição u em Ω é um funcional linear $u : D(\Omega) \rightarrow \mathbb{C}$ contínuo, isto é, satisfazendo

$$\phi_n \rightarrow \phi \text{ em } D(\Omega) \Rightarrow u(\phi_n) \rightarrow u(\phi) \text{ em } \mathbb{C}. \quad (\text{D.8})$$

O conjunto de todas as distribuições u em Ω é denotado por $D'(\Omega)$.

■

Uma notação bastante comum na literatura consiste em escrever $u(\phi) = \langle u, \phi \rangle$ para denotar que o funcional $u \in D'(\Omega)$ é aplicado sobre $\phi \in D(\Omega)$.

Um critério para continuidade de uma distribuição é dado a seguir:

Teorema D.1. Seja $u : D(\Omega) \rightarrow \mathbb{C}$ linear. Então u é contínuo se, e somente se $\forall K \subset \Omega$ compacto, existem uma constante $C > 0$ e um número $m \in \mathbb{N}$ tal que

$$|u(\phi)| \leq C \sum_{|\alpha| \leq m} \|\partial^{|\alpha|} \phi\|_{L^\infty(K)} \quad \forall \phi \in D(K). \quad (\text{D.9})$$

Demonstração. Ver [24].

□

Um exemplo de distribuição pode ser dado da seguinte forma: defina $u_f : D(\Omega) \rightarrow \mathbb{C}$ dado por

$$u_f(\phi) \doteq \int_{\Omega} f(x)\phi(x)dx \quad f \in C(\Omega). \quad (\text{D.10})$$

Obviamente (D.10) é linear. Além disso, se $\phi \in D(K)$ e $K \subset \Omega$, temos

$$\begin{aligned} |u_f(\phi)| &\leq \int_{\Omega} |f(x)||\phi(x)|dx = \\ &= \int_K |f(x)||\phi(x)|dx \\ &\leq \|\phi\|_{L^\infty(K)} \int_K |f(x)|dx = \|f\| \\ &\leq C\|\phi\|_{L^\infty(K)}, \end{aligned} \quad (\text{D.11})$$

já que f tem suporte compacto. Portanto, u_f é um funcional linear e contínuo, definindo assim uma distribuição em Ω .

Definição D.6. (*Delta de Dirac*) Seja $x_0 \in \Omega$ fixado. Definimos a delta de Dirac δ_{x_0} como o funcional linear contínuo

$$\delta_{x_0}(\phi) \equiv \langle \delta_{x_0}, \phi \rangle \doteq \phi(x_0) \quad \forall \phi \in D(\Omega). \quad (\text{D.12})$$

■

Note que a combinação linear de funções delta é também uma distribuição.

Consideremos agora $\Omega_1 \subset \mathbb{R}^n$ e $\Omega_2 \subset \mathbb{R}^m$ dois conjuntos abertos não-vazios. Assuma que $\phi \in C^\infty(\Omega_1 \times \Omega_2)$ satisfaça a seguinte hipótese: para qualquer $y' \in \Omega_2$ existem uma vizinhança $V(y') \subset \Omega_2$ de y' e um conjunto $K_{y'} \subset \Omega_1$ tal que $\text{supp}(\phi(\cdot, y))^2 \subset K_{y'}$, para todo $y' \in V(y')$. Então, para todo $u \in D'(\Omega_1)$, a aplicação

$$y \rightarrow \langle u_x, \phi(x, y) \rangle \doteq \langle u, \phi(\cdot, y) \rangle \in C^\infty(\Omega_2). \quad (\text{D.13})$$

Proposição D.1. Se $u \in D'(\Omega_1)$ e $\phi \in D(\Omega_1 \times \Omega_2)$ então a função $y \rightarrow \langle u_x, \phi(\cdot, y) \rangle$ pertence à $D(\Omega_2)$.

Demonstração. Com a notação anterior, basta tomar $V(y') = \Omega_2$ e denotando por $\Pi_1 : \Omega_1 \times \Omega_2 \rightarrow \Omega_1$ a função projeção $(x, y) \rightarrow x$, tomar $K_{y'} = \Pi_1(\text{supp}(\phi(x, y)))$. □

²A notação $\phi(\cdot, y)$ indica um mapa $x \rightarrow \phi(x, y)$ com y fixado.

Dados $u \in D'(\Omega_1)$ e $v \in D'(\Omega_2)$, a proposição anterior nos permite definir o seguinte mapa

$$\langle u \otimes v, \phi \rangle \doteq \langle v_y, \langle u_x, \phi(x, y) \rangle \rangle \quad \forall \phi \in D(\Omega_1 \times \Omega_2). \quad (\text{D.14})$$

O mapa anterior nos permite considerar distribuições para funções definidas no produto cartesiano de $\Omega_1 \times \Omega_2$ de maneira natural à partir das definições anteriores de distribuição em Ω .

Por fim, vamos definir agora a noção de *derivada funcional* no contexto de distribuições, como introduzida em [19].

Definição D.7. (*Derivada funcional*) *Seja $u \in D'(\Omega)$ e $f \in D(\Omega)$. Definimos a derivada de $\langle u, f \rangle$ na direção de $g \in D(\Omega)$ como o limite*

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\langle u, f + \epsilon g \rangle - \langle u, f \rangle}{\epsilon}, \quad (\text{D.15})$$

quando esse limite existir. Escrevemos, nesse caso, $D_g \langle u, f \rangle = D_g u(f)$.

■

Um caso particular de (D.15) em que $u = \delta_{x_0}$ nos leva à identidade

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\langle \delta_{x_0}, f + \epsilon g \rangle - \langle \delta_{x_0}, f \rangle}{\epsilon} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\cancel{\langle \delta_{x_0}, f \rangle} + \epsilon \langle \delta_{x_0}, g \rangle - \cancel{\langle \delta_{x_0}, f \rangle}}{\epsilon} = g(x_0). \quad (\text{D.16})$$

O leitor pode verificar que a definição D.7 nos permite obter uma regra da cadeia para a derivada funcional (D.15) e, em especial, vale a identidade

$$D_g e^{\langle u, f \rangle} = D_g e^{u(f)} = e^{u(f)} D_g u(f). \quad (\text{D.17})$$

Apêndice E

Função W de Lambert

Considere a função $T : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $T(x) = xe^x$. O gráfico da função T é exibido na figura E.1.

Figura E.1: Gráfico de $T(x) = xe^x$

Uma análise rápida nos permite perceber que T é uma função estritamente decrescente no intervalo $(-\infty, -1]$ e estritamente crescente em $[-1, \infty)$. Como T é contínua, T é injetiva em cada um dos intervalos mencionados, o que indica que T é inversível em cada um desses intervalos. Defina então, duas funções auxiliares

$$\begin{aligned} f &: [-1, \infty) \rightarrow \mathbb{R} \\ g &: (-\infty, -1] \rightarrow \mathbb{R}, \end{aligned} \tag{E.1}$$

onde, $f(x) = g(x) = xe^x$. Podemos então escrever suas inversas

$$\begin{aligned} W &\doteq f^{-1} : [-1/e, \infty) \rightarrow [-1, \infty) \\ W_{-1} &\doteq g^{-1} : [-1/e, 0) \rightarrow (-\infty, -1]. \end{aligned} \quad (\text{E.2})$$

Cada uma das funções pode ser representada em um mesmo gráfico conforme a figura E.2

Figura E.2: Gráficos das funções W (linha cheia) e W_{-1} (linha pontilhada)

Vamos centrar nossa atenção apenas na função W , proposta por J.H. Lambert em 1778 e que recebe o nome de *função W de Lambert* em sua homenagem. Denotando $y = f(x) = xe^x$ conforme as definições acima, note que

$$x = f^{-1}(y) = W(y) \Rightarrow y = W^{-1}(x) = f(x) = xe^x = W(y)e^{W(y)}. \quad (\text{E.3})$$

Portanto, podemos definir a função W de maneira alternativa como a função solução da identidade

$$y = W(y)e^{W(y)}. \quad (\text{E.4})$$

Por fim, a discussão acima nos permite escrever a seguinte igualdade

$$f(W(y)) = W(y)e^{W(y)} = y, \quad (\text{E.5})$$

onde a última igualdade em (E.5) vem da identidade (E.4).

Como a função W é diferenciável, denotando sua derivada por $W'(x)$, derivamos (E.4) de ambos os lados com respeito à y a fim de obter

$$\begin{aligned} 1 &= W'(y)e^{W(y)} + W(y)e^{W(y)}W'(y) = W'(y)e^{W(y)}(1 + W(y)) \\ \Rightarrow W'(x) &= \frac{1}{e^{W(y)}(1 + W(y))} = \frac{W(y)}{x(1 + W(y))}. \end{aligned} \quad (\text{E.6})$$

Manipulando (E.6), obtemos a relação

$$\begin{aligned} \frac{W(y)}{y} &= W'(y)(1 + W(y)) = W'(y) + W'(y)W(y) \\ &= W'(y) + \frac{1}{2}(W^2(y))' = (W(y) + \frac{1}{2}W^2(y))'. \end{aligned} \quad (\text{E.7})$$

Por fim, vale mencionar que a função W possui uma representação em série de potências (c.f. [11]) dada por

$$W(y) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-n)^{n-1}}{n!} z^n, \quad (\text{E.8})$$

com raio de convergência dado por $|z| < 1/e$.

A função W de Lambert possui diversas aplicações em física, matemática, engenharia entre outras áreas. Uma discussão mais detalhada das propriedades e aplicações dessa função pode ser encontrada em [10]. Outra boa referência, utilizada inclusive na discussão acima, encontra-se em [27].

Referências Bibliográficas

- [1] R. G. Bartle. *The elements of integration and Lebesgue measure*. John Wiley & Sons, 2014.
- [2] G. Benfatto. An iterated mayer expansion for the yukawa gas. *Journal of statistical physics*, 41(3): 671–684, 1985.
- [3] G. Benfatto, G. Gallavotti, and F. Nicolo. On the massive sine-gordon equation in the first few regions of collapse. *Communications in Mathematical Physics*, 83(3):387–410, 1982.
- [4] P. Billingsley. *Probability and measure*. John Wiley & Sons, 2008.
- [5] V. I. Bogachev and V. I. Bogachev. *Gaussian measures*, volume 62. American Mathematical Society Providence, 1998.
- [6] J. Bondy and U. Murty. *R. graph theory with application*, 1976.
- [7] D. Brydges and T. Kennedy. Convergence of multiscale mayer series. In *VIII International Congress on Mathematical Physics*, pages 311–317, 1987.
- [8] D. C. Brydges. Convergence of mayer expansions. *Journal of statistical physics*, 42(3):425–435, 1986.
- [9] D. C. Brydges and T. Kennedy. Mayer expansions and the hamilton-jacobi equation. *Journal of Statistical Physics*, 48(1):19–49, 1987.
- [10] R. M. Corless, G. H. Gonnet, D. E. Hare, D. J. Jeffrey, and D. E. Knuth. On the lambertw function. *Advances in Computational mathematics*, 5(1):329–359, 1996.

- [11] R. M. Corless, D. J. Jeffrey, and D. E. Knuth. A sequence of series for the lambert w function. In *Proceedings of the 1997 international symposium on Symbolic and algebraic computation*, pages 197–204. ACM, 1997.
- [12] R. J. Duffin. Yukawan potential theory. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 35(1):105–130, 1971.
- [13] F. G. Friedlander and M. S. Joshi. *Introduction to the Theory of Distributions*. Cambridge University Press, 1998.
- [14] J. Fröhlich. Classical and quantum statistical mechanics in one and two dimensions: Two-component yukawa—and coulomb systems. *Communications in Mathematical Physics*, 47(3):233–268, 1976.
- [15] G. Gallavotti and F. Nicolò. The “screening phase transitions” in the two-dimensional coulomb gas. *Journal of statistical physics*, 39(1):133–156, 1985.
- [16] R. E. Gaunt. Inequalities for modified bessel functions and their integrals. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 420(1):373–386, 2014.
- [17] I. Gelfand and G. Shilov. Generalized functions, vol. 2, 1968.
- [18] I. M. Gelfand, N. Â. Vilenkin, and A. Feinstein. Generalized functions. vol. 4. 1964.
- [19] J. Glimm and A. Jaffe. *Quantum physics: a functional integral point of view*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [20] M. Göpfert and G. Mack. Iterated mayer expansion for classical gases at low temperatures. *Communications in Mathematical Physics*, 81(1):97–126, 1981.
- [21] J. Groeneveld. Two theorems on classical many-particle systems. *Physics Letters*, 3(1):50–51, 1962.
- [22] L. Guidi. *Dinâmica do grupo de renormalização: um estudo via equações diferenciais parciais*. PhD thesis, Instituto de Física - USP, 2003.
- [23] L. F. Guidi and D. H. Marchetti. Convergence of the mayer series via cauchy majorant method with application to the yukawa gas in the region of collapse. *arXiv preprint math-ph/0310025*, 2003.

- [24] G. Hormann and R. Steinbauer. Lecture notes on the theory of distributions. URL <http://www.mat.univie.ac.at/stein/lehre/SoSem09/distrvo.pdf>. Acessado em 07/2017.
- [25] E. Kreyszig. *Introductory functional analysis with applications*, volume 1. wiley New York, 1989.
- [26] D. H. U. Marchetti and L. Guidi. On the conjecture about the convergence of the mayer series for the yukawa gas. Não publicado.
- [27] E. W. Packel and D. S. Yuen. Projectile motion with resistance and the lambert w function. *College Mathematics Journal*, 35(5):337–350, 2004.
- [28] E. Pechersky and A. Yambartsev. Percolation properties of the non-ideal gas. *Journal of Statistical Physics*, 137(3):501–520, 2009.
- [29] O. Penrose. Convergence of fugacity expansions for fluids and lattice gases. *Journal of Mathematical Physics*, 4(10):1312–1320, 1963.
- [30] A. Procacci. Cluster expansions methods in rigorous statistical mechanics, 2014. URL <http://www.mat.ufmg.br/aldo/papers/book.pdf>.
- [31] A. Procacci and S. A. Yuhjtman. Convergence of mayer and virial expansions and the penrose tree-graph identity. *Letters in Mathematical Physics*, 107(1):31–46, 2017.
- [32] M. Reed and B. Simon. Functional analysis, vol. i, 1980.
- [33] W. Rudin. Functional analysis. international series in pure and applied mathematics, 1991.
- [34] W. Rudin et al. *Principles of mathematical analysis*, volume 3. McGraw-hill New York, 1964.
- [35] D. Ruelle. Correlation functions of classical gases. *Annals of Physics*, 25(1):109–120, 1963.
- [36] D. Ruelle. *Statistical mechanics: Rigorous results*. World Scientific, 1999.
- [37] R. Sheldon et al. *A first course in probability*. Pearson Education India, 2002.
- [38] B. Simon. *Functional integration and quantum physics*, volume 86. Academic press, 1979.

- [39] G. E. Uhlenbeck, G. W. Ford, and E. W. Montroll. Lectures in statistical mechanics. 1963.
- [40] R. J. Wilson. *An introduction to graph theory*. Pearson Education India, 1970.
- [41] Z.-H. Yang and Y.-M. Chu. On approximating the modified bessel function of the second kind. *Journal of Inequalities and Applications*, (1):1 – 6.