

SOBRE MATRIZES DE TRANSFERÊNCIA E O TEOREMA DE PERRON-FROBENIUS

EVERTON ARTUSO

RESUMO. Nesse trabalho introduzimos o formalismo das matrizes de transferência e sua aplicabilidade, via Teorema de Perron-Frobenius, na teoria de transições de fase. Apresentamos dois modelos estatísticos unidimensionais, dentre os quais um de interesse biológico proposto por Kittel e que exhibe o fenômeno de transição de fases.

1. INTRODUÇÃO

Em 1907, Oskar Perron publicou em [13] resultados sobre o espectro de matrizes positivas irredutíveis, dentre os quais, mostra que tal matriz possui um autovalor maximal, simples e estritamente positivo, cujo módulo é o raio espectral e não há nenhum outro autovalor com mesmo módulo, com autovetor associado cujas componentes também são estritamente positivas. Em 1912, Ferdinand Georg Frobenius estende em [6] alguns dos resultados de Perron, agora válidos para matrizes não negativas. Uma demonstração muito elegante do Teorema de Perron-Frobenius pode ser encontrada em [14], a qual será reproduzida em detalhes no Apêndice A. O Teorema de Perron-Frobenius tem aplicação nas mais variadas áreas, como por exemplo Equações Diferenciais Ordinárias e Parciais (Método numérico dos três pontos [10]), Economia (Modelo Econômico de Leontiev e Estabilidade de Mercados Competitivos [19]), Física (Mecânica Estatística [17]), Probabilidade e Estatística (Cadeias de Markov [4] e Modelos populacionais [8]), Saúde Pública (Epidemiologia [3]) entre outras.

O fato do Teorema de Perron-Frobenius garantir que o autovalor maximal de matrizes primitivas é simples e estritamente positivo gera consequências muito importantes na teoria da termodinâmica de sistemas físicos, por exemplo, de modo que em muitos sistemas de spins unidimensionais, a pressão - função analítica que depende da temperatura - coincide, a menos de uma constante multiplicativa, com o logaritmo natural de tal autovalor. Por definição, a *pressão* é dada como uma

Data de aceitação: Fevereiro de 2021.

Palavras chave. Matriz de Perron-Frobenius, autovalor maximal, transição de fase.

média do logaritmo da função de partição, uma quantidade que normaliza a distribuição de probabilidade de estado estacionário de configurações microscópicas, no limite termodinâmico. Já uma *transição de fase* é geralmente definida como uma singularidade da pressão em alguma das suas variáveis.

Do ponto de vista experimental, é possível distinguir entre dois tipos de transição de fase: as transições de primeira ordem, nas quais ocorre a coexistência de fases, como por exemplo um sólido de alta densidade e um fluido de baixa densidade; e as transições contínuas (de segunda ordem) nas quais flutuações e correlações crescem a tal ponto que seja macroscopicamente observável. De uma perspectiva termodinâmica, a compreensão de transições de primeira ordem se dá associando a cada fase uma *energia livre* (o que estamos denominando como pressão). A fase escolhida pelo sistema, dados certos parâmetros externos, é aquela com a menor energia livre de modo que uma transição de fase ocorre quando as energias livres de duas (ou mais) fases são iguais. Mudanças repentinas em quantidades macroscopicamente mensuráveis que ocorrem em transições de primeira ordem são descritas matematicamente como descontinuidades na primeira derivada da energia livre. Já as descontinuidades em derivadas de ordem superior estão relacionadas a transições de fase contínuas (de ordem superior). [1]

Um dos modelos que tradicionalmente introduz o método da matriz de transferência é o conhecido modelo de Ising, que em uma dimensão não apresenta transição de fase, mas em maiores dimensões tais transições ocorrem [5], [17]. Em particular, a técnica da matriz de transferência foi utilizada por Onsager em [12] na solução original do modelo de Ising em duas dimensões.

Outro exemplo é o modelo de Kittel resolvido via matriz de transferência (conforme [2]), cuja solução original utilizou séries geométricas, em [9]. Aplicar a técnica da matriz de transferência nesse modelo se caracteriza como um recurso didático, uma vez que tal recurso é rico em detalhes. Este modelo unidimensional não se encaixa completamente nas hipóteses do Teorema de Perron-Frobenius (fato este apontado pelo próprio Kittel em [9]), o que enriquece a discussão, uma vez que apresenta transição de fase conforme o número de configurações do seu espaço de estados; a saber, se o espaço de estados (ou seja, o conjunto de estados que um sítio da rede unidimensional pode assumir) tiver apenas dois estados (fechado e aberto), o modelo não apresenta transição de fase, todavia a transição ocorre se houver mais estados (diferentes estados para distintas forma de abertura, por exemplo). A técnica da matriz de transferência será utilizada a fim de mostrar que a transição de fase está associada à degenerescência do seu autovalor máximo.

Inicialmente enunciamos o Teorema de Perron-Frobenius e um Teorema auxiliar e depois os aplicamos, juntamente com o formalismo da matriz de transferência, aos modelos de Ising e de Kittel. Por fim, demonstramos o Teorema de Perron-Frobenius no Apêndice A.

2. MATRIZ DE PERRON-FROBENIUS

Uma matriz $M = (m_{i,j})_{0 \leq i,j \leq s-1}$ é dita *não negativa* se cada uma das suas entradas for não negativa. Em outros termos, para todo $i, j \in \{0, \dots, s-1\}$, $m_{i,j} \geq 0$. Uma matriz não negativa M é dita *irredutível* se, para todo i, j existe algum $k \geq 1$ tal

que $m_{ij}^{(k)} > 0$, denotando por $(m_{ij}^{(k)})$ as entradas da k -ésima potência de M , a saber, M^k . Ela é dita *primitiva* se M^k é positiva para algum $k \geq 1$, isto é, todos os $m_{ij}^{(k)} > 0$ para o mesmo k , e o menor k tal que isso acontece é chamado de *índice de primitividade* de M .

Teorema 2.1 (Perron-Frobenius). [14] *Seja M uma matriz primitiva. Então*

- (i) *M admite um autovalor θ tal que $|\lambda| < \theta$ para quaisquer outros autovalores λ de M .*
- (ii) *Existe um autovetor com todas as entradas positivas associado ao autovalor θ .*
- (iii) *θ é um autovalor simples, ou seja, tem multiplicidade algébrica um.*

Demonstração. Apresentaremos a demonstração do teorema no apêndice A.

O Teorema de Perron-Frobenius apresenta várias aplicações, muitas das quais apresentadas em [11], onde também encontramos diversas demonstrações do referido Teorema.

2.1. Transição de Fase. Muitas vezes, transições de fase podem ser detectadas por meio de singularidades na energia livre no limite termodinâmico, ou seja, a quebra de analiticidade da pressão topológica. A pressão, por sua vez, coincide com o maior autovalor (também dependente da temperatura e do campo magnético) da matriz de transferência. As ferramentas essenciais para a execução dessa análise são o Teorema de Perron-Frobenius e outro teorema que garante a analiticidade dos autovalores da matriz de transferência.

Embora fundamental, o Teorema de Perron-Frobenius não é suficiente para mostrar se há ou não transição de fase quando as entradas da matriz de transferência dependem do parâmetro $\beta = 1/kT$, associado ao inverso da temperatura. Nesse caso temos uma família de matrizes dependendo da temperatura, $M(\beta)$, e precisamos de outro resultado válido para matrizes analíticas em β (ou seja, todos os seus elementos são funções analíticas de β).

Teorema 2.2. [2] *Para todo β em um conjunto simplesmente conexo $D \subset \mathbb{C}$, seja $M(\beta)$ um operador linear em um espaço vetorial X n -dimensional ($M(\beta)$ é uma matriz complexa $n \times n$). Se $M(\beta)$ for analítica em D então cada um dos s autovalores de $M(\beta)$ têm multiplicidade constante e cada um deles pode ser expresso como uma função analítica em D , $\lambda_j(\beta)$, $j \in \{1, \dots, s\}$.*

Demonstração. A demonstração deste resultado exige conhecimentos prévios em assuntos como conexidade, singularidades, polos removíveis, entre outros, fugindo do escopo do trabalho. Tal demonstração encontra-se em [7], Capítulo II, Teorema 1.8.

Assim, para uma matriz de transferência não negativa irredutível $M(\beta)$ - caso mais geral do que o que demonstramos (matriz primitiva) - cujos elementos são funções analíticas em uma vizinhança do eixo real positivo, $\beta > 0$, os Teoremas 2.1 e 2.2 garantem que o autovalor maximal (portanto a pressão) é uma função analítica de β , para todo $\beta > 0$. Para matrizes não negativas irredutíveis, o Teorema pode ser encontrado em [18].

3. MODELO DE ISING

Consideremos uma amostra de algum material cujos átomos estão arranjados em uma estrutura regular cristalina. Suponhamos que cada um desses átomos carrega um momento magnético (algo como um ímã ligado a cada átomo) chamado de *spin*. Assumamos que cada spin tem a tendência de se alinhar com seus vizinhos e que, inicialmente, esteja orientados aleatoriamente, como na Figura 1. Nessa seção, nos baseamos em [5].

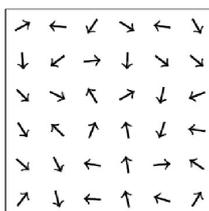


FIGURA 1. [5] Estado inicial.

Se o material é exposto a um campo magnético externo apontando numa direção específica, então um tipo de ordem aparece: os spins tendem a se alinhar com o campo, e assim apontam na mesma direção. Se diminuirmos devagar a intensidade do campo externo até zero, dois casos podem ocorrer.

Na Figura 2, a ordem global é progressivamente perdida conforme o campo decresce, chegando a zero, quando os spins tornam-se desordenados novamente, como no seu estado inicial. Tal comportamento é chamado *paramagnético*.

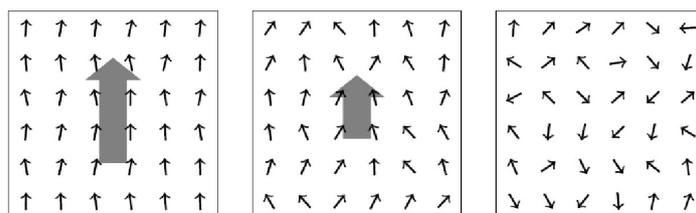


FIGURA 2. [5] Campo magnético decrescente.

Esse fenômeno pode ser medido quantitativamente ao se introduzir a *magnetização*, que é a média dos spins, projetada na direção do campo magnético. Para o paramagneto, conforme o campo decresce de um valor positivo para zero (mantendo a direção fixada), ou similarmente, se ele cresce de um valor negativo para zero, a magnetização tende a zero, como na Figura 3.

Ainda outro cenário é possível: como o campo externo decresce, a ordem global decresce, mas a interação local entre os spins é forte o suficiente para manter o material em estado de magnetização global mesmo depois que o campo externo tenha alcançado zero. Tal comportamento é chamado *ferromagnetismo*, representado na Figura 4.

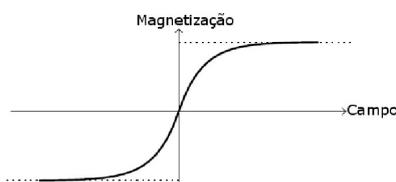


FIGURA 3. [5]

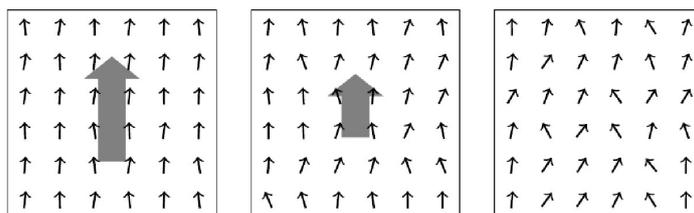


FIGURA 4. [5] Ferromagnetismo.

Um ferromagneto exibe, portanto, *magnetização espontânea*, que é uma ordem global produzida mesmo com a ausência de um campo magnético externo. O valor da magnetização espontânea, $\pm m^*$, depende da forma em que o campo externo se aproxima de zero (de > 0 ou < 0), representado na Figura 5.

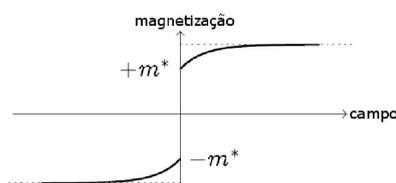


FIGURA 5. [5] Magnetização espontânea.

Usando o processo descrito, pode-se, a princípio, preparar um material ferromagnético com magnetização espontânea em uma direção arbitrária aplicando o campo magnético nessa direção, e fazê-lo decrescer lentamente a zero. Pode-se observar ainda que, na Figura 5, quando o campo vai para zero, a magnetização tem uma descontinuidade e salta de um valor estritamente positivo para um valor estritamente negativo, o que representa uma *transição de fase* de primeira ordem.

O modelo de Ising é um modelo simples que busca reproduzir as propriedades descritas acima. A principal simplificação é assumir que os spins são restritos a uma direção particular, apontando para cima ou para baixo. Apesar de ser um modelo simples, é útil na descrição de outros sistemas (tais como um gás) que, com as devidas simplificações, pode ser mapeado pelo modelo de Ising. Para mais detalhes, veja [5].

3.1. Sistema de spins de Ising. Os spins podem ser encontrados em dois estados, tradicionalmente denotados por $+1$ ("para cima") e -1 ("para baixo"), e interagem

com cada outro spin e com o campo magnético externo. Esses spins serão identificados com os nós (vértices) de um grafo, que será o modelo da estrutura cristalina.

Considere um conjunto finito de pontos V com a estrutura de grafo não orientado sem loops e com no máximo uma aresta entre cada par de pontos. Quando $\{i, j\}$ é uma aresta do grafo, diremos que $j \in V$ é um *vizinho* de $i \in V$. Em cada sítio $i \in V$ encontra-se uma variável ς_i tomando dois possíveis valores, ± 1 . Um estado microscópico do sistema, geralmente chamado de *configuração*, é dado pelo estado específico dos spins em cada vértice, isto é, por um elemento $\omega \in \Omega_V := \{-1, 1\}^V$. A variável aleatória $\varsigma_i : \Omega_V \rightarrow \{-1, 1\}$ definida por $\varsigma_i(\omega) := \omega_i$ dá o valor do spin no vértice i , e a configuração ω é também geralmente chamada de spin em i .

As interações entre os spins são definidas de tal forma que:

- *Os spins interagem somente com os spins localizados em sua vizinhança* (no sentido de grafos). Assumindo que os spins em dois sítios distintos $i, j \in V$ interagem se, e só se, o par $\{i, j\}$ é uma aresta do grafo, que denotamos por $i \sim j$.
- *A interação deve favorecer a concordância entre os valores dos spins*. Na forma mais simples do modelo, a qual é tratada aqui, isto é feito da seguinte forma: um par de spins nos vértices i e j de uma aresta *diminui* a energia global das configurações se elas concordam ($\varsigma_i = \varsigma_j$), e *umenta* a energia global se elas diferem. Mais precisamente, os spins nos vértices das arestas $\{i, j\}$ contribuem para a energia total por uma quantidade $-\beta\varsigma_i\varsigma_j$, onde $\beta \geq 0$ mede a força da interação, e também interpreta o inverso da temperatura. Assim, em baixas temperaturas, configurações nas quais a maioria dos pares de vizinhos estão alinhados tem menor energia.
- *Cada spin pode interagir com um campo magnético externo*. No caso de um campo magnético externo constante $h \in \mathbb{R}$ agindo sobre o sistema, sua interação com o spin no sítio i contribui para a energia total pela quantidade $-h\varsigma_i$. Isto é, quando o campo magnético é positivo, as configurações com maioria dos seus spins iguais a $+1$ tem menor energia.

A *energia* de uma configuração ω é obtida através da soma das interações sobre todos os pares, e pela adição da interação de cada spin com o campo magnético:

$$(1) \quad H := -\beta \sum_{i \sim j} \varsigma_i \varsigma_j - h \sum_i \varsigma_i.$$

A função H é também conhecida como o *Hamiltoniano*. De acordo com a Mecânica Estatística, a probabilidade de observação do sistema na configuração ω é dada por

$$(2) \quad \mu(\omega) := \frac{1}{Z} \exp(-H(\omega)),$$

onde $e^{-H(\omega)}$ é conhecido como *peso de Boltzmann*. A constante de normalização

$$(3) \quad Z := \sum_{\omega \in \Omega_V} \exp(-H(\omega))$$

desempenha um importante papel na teoria, e é conhecida como *função de partição*.

Dois pontos $i, j \in \mathbb{Z}$ são *vizinhos próximos* se $|j - i| = 1$, que denotamos por $i \sim j$. Denotamos por V_N uma *caixa de tamanho linear* N unidimensional,

$$(4) \quad V_N := \{x \in \mathbb{Z} : 0 \leq x < N\}.$$

Para mais detalhes, veja [5].

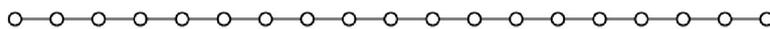


FIGURA 6. [5] Caixa unidimensional.

O objetivo é estudar o modelo de Ising em uma caixa grande V_N . Assim, iremos considerar o modelo através de uma sequência de caixas crescentes $V_1, V_2, \dots, V_N, \dots$, e descrever o seu comportamento no *limite termodinâmico*, isto é, quando $N \rightarrow \infty$. A *pressão* é dada pelo limite (quando este existir)

$$(5) \quad \psi(\beta, h) := \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{|V_N|} \log Z_{V_N, \beta, h}.$$

Uma *transição de fase* é geralmente definida como uma singularidade da pressão em alguma das suas variáveis.

Seja T_N o grafo obtido por ligar $N - 1$ com 0 em $V_N = \{0, 1, \dots, N - 1\}$ como um toro (Figura 7). Formalmente, T_N é obtido de V_N adicionando-lhe uma aresta entre $N - 1$ e 0 .

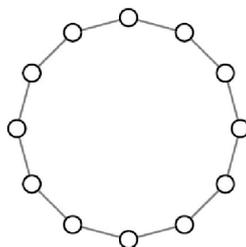


FIGURA 7. [5] Envolvendo V_N em um toro T_N .

Iremos calcular $\psi_\beta(h)$ usando o toro T_N ao invés de V_N . A saber, como o grafo T_N pode ser obtido de V_N adicionando-lhe uma aresta (conectando $N - 1$ a 0), temos

$$-\beta \leq H_{V_N, \beta, h}(\omega) - H_{T_N, \beta, h}(\omega) \leq \beta.$$

Por consequência, $e^{-\beta} Z_{T_N, \beta, h} \leq Z_{V_N, \beta, h} \leq e^\beta Z_{T_N, \beta, h}$. Assim, se existe, o limite é

$$(6) \quad \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{|V_N|} \log Z_{T_N, \beta, h} = \psi_\beta(h).$$

A vantagem de se trabalhar com T_N ao invés de V_N é que $Z_{T_N, \beta, h}$ pode ser escrito como o traço de uma matriz 2×2 . De fato, definindo $\omega_N = \omega_0$,

$$(7) \quad Z_{T_N, \beta, h} = \sum_{\omega \in \Omega_{V_N}} e^{-H_{V_N, \beta, h}(\omega)} = \sum_{\substack{\omega_j = \pm 1 \\ j \in \{0, \dots, N-1\}}} \prod_{i=0}^{N-1} e^{\beta \omega_i \omega_{i+1} + h \omega_i} = \sum_{\substack{\omega_j = \pm 1 \\ j \in \{0, \dots, N-1\}}} \prod_{i=0}^{N-1} A_{\omega_i, \omega_{i+1}},$$

onde os números $A_{+,+} = e^{\beta+h}$, $A_{+,-} = e^{-\beta+h}$, $A_{-,+} = e^{-\beta-h}$ e $A_{-,-} = e^{\beta-h}$ podem ser colocados na forma de uma matriz, chamada de *matriz de transferência*:

$$(8) \quad A = \begin{pmatrix} e^{\beta+h} & e^{-\beta+h} \\ e^{-\beta-h} & e^{\beta-h} \end{pmatrix}.$$

Uma observação útil é que $Z_{T_N, \beta, h}$ pode ser interpretado com o traço da N -ésima potência de A :

$$(9) \quad Z_{T_N, \beta, h} = \sum_{\omega_0 = \pm 1} (A^N)_{\omega_0, \omega_0} := \text{tr}(A^N).$$

Tal fato pode ser provado utilizando o princípio da indução forte. Usando a condição de contorno $\omega_{N+1} = \omega_0$, para $N = 2$, temos

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{w_j = \pm 1 \\ j=0,1}} \prod_{i=0}^1 A_{\omega_i, \omega_{i+1}} &= \sum_{\substack{w_j = \pm 1 \\ j=0,1}} A_{\omega_0, \omega_1} A_{\omega_1, \omega_0} \\ &= A_{+,+} A_{+,+} + A_{+,-} A_{-,+} + A_{-,+} A_{+,-} + A_{-,-} A_{-,-} \\ &= (A_{1,1} A_{1,1} + A_{1,2} A_{2,1}) + (A_{2,1} A_{1,2} + A_{1,1} A_{1,1}) \\ &= (A^2)_{1,1} + (A^2)_{2,2} = \text{tr}(A^2). \end{aligned}$$

Faremos o caso $N = 3$ para clarear o raciocínio:

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{w_j = \pm 1 \\ j=0,1,2}} \prod_{i=0}^2 A_{\omega_i, \omega_{i+1}} &= \sum_{\substack{w_j = \pm 1 \\ j=0,1,2}} A_{\omega_0, \omega_1} A_{\omega_1, \omega_2} A_{\omega_2, \omega_0} \\ &= A_{1,1} A_{1,1} A_{1,1} + A_{1,1} A_{1,2} A_{2,1} + A_{1,2} A_{2,1} A_{1,1} + A_{1,2} A_{2,2} A_{2,1} \\ &\quad + A_{2,1} A_{1,1} A_{1,2} + A_{2,1} A_{1,2} A_{2,2} + A_{2,2} A_{2,1} A_{1,2} + A_{2,2} A_{2,2} A_{2,2} \\ &= A_{1,1} (A^2)_{1,1} + A_{1,2} (A_{2,1} A_{1,1} + A_{2,2} A_{2,1}) \\ &\quad + A_{2,1} (A_{1,2} A_{2,2} + A_{1,1} A_{1,2}) + A_{2,2} (A^2)_{2,2} \\ &= A_{1,1} (A^2)_{1,1} + A_{1,2} (A^2)_{2,1} + A_{2,1} (A^2)_{1,2} + A_{2,2} (A^2)_{2,2} \\ &= (A^3)_{1,1} + (A^3)_{2,2} = \text{tr}(A^3). \end{aligned}$$

Note que, para $s \geq 0$,

$$(10) \quad \text{tr}(A^N) = \sum_{i=1,2} (A^{N-s} A^s)_{i,i} = \sum_{i=1,2} \sum_{k=1,2} (A^{N-1})_{i,k} (A^s)_{k,i}.$$

Supondo que a igualdade (9) seja válida para qualquer $t \leq N$, $t \in \mathbb{N}$, vamos provar para $N + 1$: De fato, como $\sum_{w_N=\pm 1} A_{\omega_{N-1},\omega_N} A_{\omega_N,\omega_0} = (A^2)_{\omega_{N-1},\omega_0}$, temos

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{w_j=\pm 1 \\ j \in \{0, \dots, N\}}} \prod_{i=0}^N A_{\omega_i, \omega_{i+1}} &= \sum_{\substack{w_j=\pm 1 \\ j \in \{0, \dots, N\}}} A_{\omega_0, \omega_1} A_{\omega_1, \omega_2} \cdots A_{\omega_{N-1}, \omega_N} A_{\omega_N, \omega_0} \\ &= \sum_{w_N=\pm 1} \left(\sum_{\substack{w_j=\pm 1 \\ j \in \{0, \dots, N-1\}}} A_{\omega_0, \omega_1} \cdots A_{\omega_{N-2}, \omega_{N-1}} \right) A_{\omega_{N-1}, \omega_N} A_{\omega_N, \omega_0} \\ &= \sum_{\substack{w_j=\pm 1 \\ j \in \{0, N-1\}}} (A^{N-1})_{\omega_0, \omega_{N-1}} (A^2)_{\omega_{N-1}, \omega_0} \\ &= \sum_{w_0=\pm 1} (A^{N+1})_{\omega_0, \omega_0} = \text{tr}(A^{N+1}). \end{aligned}$$

Assim, reduzimos o problema de encontrar a função de partição ao de encontrar a soma dos elementos diagonais (traço) da N -ésima potência da matriz de transferência. Por outro lado, o traço de matriz, na base conveniente, é simplesmente a soma de seus autovalores, e os autovalores de A^N são λ_{\pm}^N , uma vez que λ_{\pm} são os autovalores de A determinados pelo polinômio característico resultante de

$$(11) \quad \begin{vmatrix} e^{\beta+h} - \lambda & e^{-\beta+h} \\ e^{-\beta-h} & e^{\beta-h} - \lambda \end{vmatrix} = 0,$$

dado por

$$(12) \quad \lambda^2 - \lambda e^{\beta} (e^h + e^{-h}) + (e^{2\beta} - e^{-2\beta}) = 0,$$

cujas soluções são

$$\begin{aligned} \lambda_{\pm} &= \frac{1}{2} \left[e^{\beta} (e^h + e^{-h}) \pm \sqrt{e^{2\beta} (e^h + e^{-h})^2 - 4(e^{2\beta} - e^{-2\beta})} \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[e^{\beta} (2 \cosh(h)) \pm \sqrt{e^{2\beta} (2 \sinh(h))^2 - 4(2 \sinh(2\beta))} \right] \\ (13) \quad &= e^{\beta} \cosh(h) \pm \sqrt{e^{2\beta} \cosh^2(h) - 2 \sinh(2\beta)}, \end{aligned}$$

em que utilizamos as identidades $e^x - e^{-x} = 2 \sinh(x)$ e $e^x + e^{-x} = 2 \cosh(x)$. Assim A tem dois autovalores $\lambda_+ > \lambda_-$ dados por

$$(14) \quad \lambda_{\pm} = e^{\beta} \cosh(h) \pm \sqrt{e^{2\beta} \cosh^2(h) - 2 \sinh(2\beta)}.$$

Como A pode ser diagonalizado, $A = BDB^{-1}$ onde D é uma matriz diagonal cujos elementos da diagonal são λ_+ e λ_- , e como o traço satisfaz $\text{tr}(GH) = \text{tr}(HG)$, temos

$$(15) \quad Z_{T_N, \beta, h} = \text{tr}(A^N) = \text{tr}(BD^N B^{-1}) = \text{tr}(D^N) = \lambda_+^N + \lambda_-^N,$$

o que pode ser escrito como

$$(16) \quad Z_{T_N, \beta, h} = \lambda_+^N \left(1 + \frac{\lambda_-^N}{\lambda_+^N} \right),$$

e como $\lambda_+ > \lambda_-$, tomando o limite termodinâmico temos

$$(17) \quad \psi_\beta(h) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{|V_N|} \log Z_{T_N, \beta, h} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{|V_N|} \log \left(\lambda_+^N \left(1 + \frac{\lambda_-^N}{\lambda_+^N} \right) \right) = \log \lambda_+.$$

Ou seja, $\psi_\beta(h) = \log \lambda_+$, e para todo $\beta \geq 0$, e todo $h \in \mathbb{R}$, a pressão $\psi_\beta(h)$ existe e é igual a

$$(18) \quad \psi_\beta(h) = \log \left\{ e^\beta \cosh(h) + \sqrt{e^{2\beta} \cosh^2(h) - 2 \sinh(2\beta)} \right\},$$

que é uma função analítica.

Em outros termos, tratamos de um modelo simples, pois o fato da pressão não apresentar nenhuma quebra de analiticidade garante que o modelo de Ising unidimensional não apresenta coexistência de fases, não havendo, portanto, nenhuma transição de fase. Note que não precisamos utilizar os Teoremas 2.1 e 2.2 nessa abordagem. Todavia se, ao invés de realizarmos todos os cálculos para mostrar a analiticidade da pressão, aplicássemos diretamente os Teoremas 2.1 e 2.2 na Matriz de Transferência do modelo, uma vez que essa satisfaz suas hipóteses, garantiríamos a existência de um único autovalor simples e maximal $\lambda(\beta)$ e a analiticidade da função $\log(\lambda(\beta))$.

Em geral, o comportamento assintótico (quando $N \rightarrow \infty$) do sistema descrito pela distribuição de Gibbs em uma caixa suficientemente grande pode ser relacionado com as propriedades analíticas da pressão em h . Assumindo que o limite e as derivadas podem ser intercambiados (o que acontece sob certas circunstâncias, veja [15]),

$$(19) \quad \frac{\partial \psi_\beta(h)}{\partial h} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{|V_N|} \frac{\partial}{\partial h} \log Z_{V_N, \beta, h} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\langle \frac{M_N}{|V_N|} \right\rangle_{V_N, \beta, h} = m_\beta(h),$$

e portanto, a magnetização média está relacionada com a derivada da pressão.

A pressão $\psi_\beta(h)$ do Modelo de Ising unidimensional é analítica em h em todas as temperaturas. De fato, temos, pela equação (18),

$$(20) \quad \begin{aligned} m_\beta(h) = \frac{\partial \psi_\beta(h)}{\partial h} &= \frac{\frac{e^{2\beta} \cosh(h) \sinh(h)}{\sqrt{e^{2\beta} \cosh^2(h) - 2 \sinh(2\beta)}} + e^\beta \sinh(h)}{\sqrt{e^{2\beta} \cosh^2(h) - 2 \sinh(2\beta)} + e^\beta \cosh(h)} \\ &= \frac{\frac{e^\beta \cosh(h) \sinh(h)}{\sqrt{\cosh^2(h) - 2e^{-2\beta} \sinh(2\beta)}} + e^\beta \sinh(h)}{e^\beta \sqrt{\cosh^2(h) - 2e^{-2\beta} \sinh(2\beta)} + e^\beta \cosh(h)} \\ &= \frac{\frac{\cosh(h) \sinh(h)}{\sqrt{\cosh^2(h) - 2e^{-2\beta} \sinh(2\beta)}} + \sinh(h)}{\sqrt{\cosh^2(h) - 2e^{-2\beta} \sinh(2\beta)} + \cosh(h)}. \end{aligned}$$

Em particular, $\frac{\partial \psi_\beta}{\partial h}(0) = 0$. Somente no limite $\beta \rightarrow \infty$ a função $\psi_\beta(h)$ se torna não diferenciável em $h = 0$, pois

$$(21) \quad \begin{aligned} \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\partial \psi_\beta(h)}{\partial h} &= \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\frac{\cosh(h) \sinh(h)}{\sqrt{\cosh^2(h) - 2e^{-2\beta} \sinh(2\beta)}} + \sinh(h)}{\sqrt{\cosh^2(h) - 2e^{-2\beta} \sinh(2\beta)} + \cosh(h)} \\ &= \frac{\frac{\cosh(h) \sinh(h)}{\sqrt{\cosh^2(h) - 1}} + \sinh(h)}{\sqrt{\cosh^2(h) - 1} + \cosh(h)} = \begin{cases} 1 & \text{se } h > 0 \\ -1 & \text{se } h < 0 \end{cases}, \end{aligned}$$

e o limite $\lim_{h \rightarrow 0} \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\partial \psi_\beta(h)}{\partial h}$ não existe. De fato, para qualquer $\beta > 0$, temos $m_\beta(h) = 1$ quando $h \rightarrow +\infty$, pois

$$(22) \quad \begin{aligned} \lim_{h \rightarrow \infty} m_\beta(h) &= \lim_{h \rightarrow \infty} \frac{\frac{\cosh(h) \sinh(h)}{\sqrt{\cosh^2(h) - 2e^{-2\beta} \sinh(2\beta)}} + \sinh(h)}{\sqrt{\cosh^2(h) - 2e^{-2\beta} \sinh(2\beta)} + \cosh(h)} \\ &= \lim_{h \rightarrow \infty} \frac{\frac{(e^h + e^{-h})(e^h - e^{-h})}{\sqrt{(e^h + e^{-h})^2 - 4e^{-2\beta}(e^{2\beta} - e^{-2\beta})}} + e^h - e^{-h}}{\sqrt{(e^h + e^{-h})^2 - 4e^{-2\beta}(e^{2\beta} - e^{-2\beta})} + e^h + e^{-h}} \\ &= \lim_{h \rightarrow \infty} \frac{\frac{e^h - e^{-3h}}{\sqrt{1 + 2e^{-h} + e^{-3h} - 4e^{-2(\beta+h)}(e^{2\beta} - e^{-2\beta})}} + e^h - e^{-h}}{e^h \left(\sqrt{1 + 2e^{-h} + e^{-2h} - 4e^{-2(\beta+h)}(e^{2\beta} - e^{-2\beta})} + 1 + e^{-2h} \right)} \\ &= \lim_{h \rightarrow \infty} \frac{\frac{1 - e^{-4h}}{\sqrt{1 + 2e^{-h} + e^{-3h} - 4e^{-2(\beta+h)}(e^{2\beta} - e^{-2\beta})}} + 1 - e^{-2h}}{\sqrt{1 + 2e^{-h} + e^{-2h} - 4e^{-2(\beta+h)}(e^{2\beta} - e^{-2\beta})} + 1 + e^{-2h}} = 1, \end{aligned}$$

e, de modo similar, $m_\beta(h) = -1$ quando $h \rightarrow -\infty$. Portanto,

$$(23) \quad \lim_{\beta \rightarrow \infty} m_\beta(h) = \begin{cases} 1 & \text{se } h > 0 \\ -1 & \text{se } h < 0 \end{cases},$$

a derivada da pressão não é contínua em 0 e ψ_β não é analítica no limite $\beta \rightarrow \infty$.

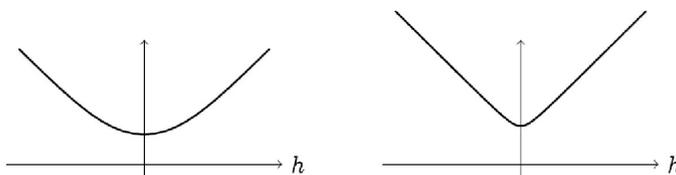
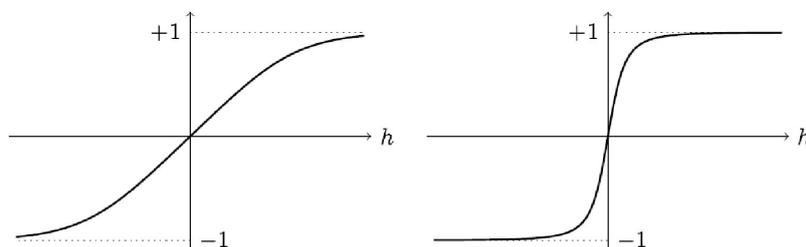


FIGURA 8. [5] A pressão $\psi_\beta(h)$ para $\beta = 0.8$ a esquerda e $\beta = 2$ a direita.

Pela expressão explicitada em (18) a aplicação $h \rightarrow \psi_\beta(h)$ é analítica e assim, diferenciável com respeito a h . Como mencionado anteriormente, a derivada da pressão representa a densidade de magnetização média $m_\beta(h) = \frac{\partial \psi_\beta(h)}{\partial h}$, que no caso do Modelo de Ising unidimensional, é representado na Figura 9.

Para mais detalhes, consulte [5] e [17].

FIGURA 9. [5] $m_\beta(h)$ para $\beta = 0.8$ e $\beta = 2$.

4. MODELO DE KITTEL VIA MATRIZ DE TRANSFERÊNCIA

O modelo de Kittel é de fato um modelo de 'zíper' (fecho de correr) de extremidade única, discutido "como uma boa maneira de introduzir um exemplo de biofísica em um curso de física estatística", e inspirado em modelos de 'zíper' duplo de polipeptídeo ou moléculas de DNA - Figura 10.

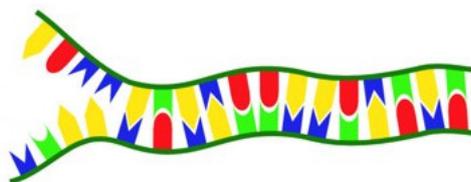


FIGURA 10. [20] O modelo de zíper de Kittel foi baseado em ligações de moléculas de DNA.

Conforme [9], vamos considerar um 'zíper' de N ligações que podem ser abertas apenas por uma extremidade. Se as ligações $1, 2, \dots, n$ estão todas abertas, a energia necessária para abrir a ligação $n + 1$ é ε ; no entanto, se nem todas as ligações anteriores estiverem abertas, a energia necessária para abrir a ligação $n + 1$ será infinita. A ligação N (a última) não pode ser aberta, e diz-se que o 'zíper' está aberto quando as primeiras $N - 1$ ligações estiverem. Kittel supôs que existem G orientações que cada ligação aberta pode assumir, isto é, o estado aberto de uma ligação é G -fold degenerado, correspondendo a liberdade rotacional de uma ligação (esta pode assumir valores de 1 a G quando aberta). Não haverá transição de fase para $G = 1$ (neste caso temos $0 \leftrightarrow$ fechada e $1 \leftrightarrow$ aberta), como mostra [9]. A energia requerida para abrir as primeiras p ligações é $p\varepsilon$; se p ligações estiverem abertas, a degenerescência é G^p .

Para introduzir o contexto do formalismo do operador de transferência, conforme [2], vamos resolver o modelo de Kittel em termos de uma matriz de transferência (o caminho de Kittel envolve séries geométricas, é muito mais simples e rápido, veja [9], todavia, devido as suas particularidades, não é um procedimento facilmente aplicável a outros modelos para os quais a matriz de transferência funciona bem).

Para esse fim, vamos escrever o modelo Hamiltoniano como

$$(24) \quad H_N = \varepsilon (1 - \delta_{s_1,0}) + \sum_{i=2}^{N-1} (\varepsilon + V_0 \delta_{s_{i-1},0}) (1 - \delta_{s_i,0})$$

onde $s_i = 0$ significa que a ligação i está fechada, $s_i = 1, 2, \dots, G$ significa que a ligação está aberta em um dos G possíveis estados, e $\delta_{s,s'}$ é o delta de Kronecker dado por

$$(25) \quad \delta_{s,s'} = \begin{cases} 1 & \text{se } s = s' \\ 0 & \text{se } s \neq s' \end{cases} .$$

A energia necessária para abrir a ligação s_i é dada por $\varepsilon + V_0 \delta_{s_{i-1},0}$, de modo que se a ligação s_{i-1} estiver aberta, então $\delta_{s_{i-1},0} = 0$, e caso esteja fechada, uma das restrições de Kittel na elaboração do modelo é que, nesse caso, a energia para a abertura da ligação i seja infinita, de onde $V_0 = \infty$. Além disso, impusemos a condição de contorno $s_N = 0$ (a extremidade mais à direita do zíper está sempre fechada). A função de partição será dada por

$$(26) \quad Z_N = \sum_{conf.} \exp(-\beta H_N),$$

com $\beta = 1/kT$ sendo o inverso da temperatura e a soma é tomada sobre todas as configurações das variáveis s_i , para $i = 1, \dots, N - 1$.

Reescreveremos a função de partição (26) usando o fato que, para todo $i = 1, \dots, N - 1$, vale

$$(27) \quad 1 + (e^{-\beta V_0} - 1) \delta_{s_i,0} (1 - \delta_{s_{i+1},0}) = \begin{cases} e^{-\beta V_0} & \text{se } s_{i+1} \neq 0 \\ 1 & \text{se } s_{i+1} = 0 \end{cases} = e^{-\beta V_0 \delta_{s_i,0} (1 - \delta_{s_{i+1},0})};$$

com efeito, se $s_i \neq 0$, o produto $\delta_{s_i,0} (1 - \delta_{s_{i+1},0})$ sempre se anula e a igualdade também ocorre, o que demonstra a igualdade (27). Aplicando a equação (24) na

equação (26), temos

$$\begin{aligned}
Z_N &= \sum_{\text{conf.}} \exp(-\beta H_N) = \sum_{\text{conf.}} \exp\left(-\beta \left[\varepsilon(1 - \delta_{s_1,0}) + \sum_{i=2}^{N-1} (\varepsilon + V_0 \delta_{s_{i-1},0}) (1 - \delta_{s_i,0}) \right]\right) \\
&= \sum_{\text{conf.}} \exp(-\beta \varepsilon (1 - \delta_{s_1,0})) \exp\left(-\beta \sum_{i=2}^{N-1} (\varepsilon + V_0 \delta_{s_{i-1},0}) (1 - \delta_{s_i,0})\right) \\
&= \sum_{\text{conf.}} \exp(-\beta \varepsilon (1 - \delta_{s_1,0})) \prod_{i=2}^{N-1} \exp(-\beta (\varepsilon + V_0 \delta_{s_{i-1},0}) (1 - \delta_{s_i,0})) \\
&= \sum_{\text{conf.}} \exp(-\beta \varepsilon (1 - \delta_{s_1,0})) \prod_{i=1}^{N-2} \exp(-\beta \varepsilon - \beta \varepsilon \delta_{s_{i+1},0} - \beta V_0 \delta_{s_i,0} + \beta V_0 \delta_{s_i,0} \delta_{s_{i+1},0}) \\
&= \sum_{\text{conf.}} \exp(-\beta \varepsilon (1 - \delta_{s_1,0})) \prod_{i=1}^{N-2} e^{-\beta \varepsilon (1 - \delta_{s_{i+1},0})} e^{-\beta V_0 \delta_{s_i,0} (1 - \delta_{s_{i+1},0})} \\
&\stackrel{(27)}{=} \sum_{\text{conf.}} \exp(-\beta \varepsilon (1 - \delta_{s_1,0})) \prod_{i=1}^{N-2} e^{-\beta \varepsilon (1 - \delta_{s_{i+1},0})} [1 + (e^{-\beta V_0} - 1) \delta_{s_i,0} (1 - \delta_{s_{i+1},0})]
\end{aligned}$$

e portanto

$$(29) \quad Z_N = \sum_{\text{conf.}} e^{-\beta \varepsilon (1 - \delta_{s_1,0})} \prod_{i=1}^{N-2} e^{-\beta \varepsilon (1 - \delta_{s_{i+1},0})} [1 + (e^{-\beta V_0} - 1) \delta_{s_i,0} (1 - \delta_{s_{i+1},0})].$$

A partir de agora, supomos que $V_0 = \infty$, logo $e^{-\beta V_0} = 0$. Considere a matriz de transferência $\mathcal{T}_{(G+1) \times (G+1)} = (t_{s,s'})$ definida como

$$(30) \quad t_{s,s'} = e^{-\beta \varepsilon (1 - \delta_{s',0})} [1 - \delta_{s,0} (1 - \delta_{s',0})],$$

com $s, s' \in \{0, 1, \dots, G\}$, ou seja,

$$(31) \quad \mathcal{T} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & e^{-\beta \varepsilon} & \dots & e^{-\beta \varepsilon} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & e^{-\beta \varepsilon} & \dots & e^{-\beta \varepsilon} \end{pmatrix}.$$

A função de partição pode ser escrita como

$$(32) \quad Z_N = \sum_{\substack{s_i \in \{0,1,\dots,G\} \\ i \in \{1,\dots,N-1\}}} e^{-\beta \varepsilon (1 - \delta_{s_1,0})} \prod_{i=1}^{N-2} t_{s_i, s_{i+1}}.$$

É importante respeitar a restrição de Kittel na qual a ligação s_{i+1} não seja aberta (não pode tomar os valores 1 ou 2) se a ligação s_i for fechada ($s_i = 0$) - a restrição diz que a energia para abrir a ligação s_i é infinita caso s_{i-1} esteja fechada. Isso produz entradas nulas na primeira linha da matriz.

A função de partição pode ser reescrita na forma

$$(33) \quad Z_N = \langle \psi, \mathcal{T}^{N-2} \phi \rangle.$$

para certos ψ e ϕ em \mathbb{R}^{G+1} satisfazendo $\langle \psi, x \rangle > 0$ e $\langle \phi, x \rangle > 0$ para $x > 0$. Assim, para $\psi = (1 \ e^{-\beta\varepsilon} \ \dots \ e^{-\beta\varepsilon})$ e $\phi^t = (1 \ 1 \ \dots \ 1)$, temos

$$(34) \quad Z_N = (1 \ e^{-\beta\varepsilon} \ \dots \ e^{-\beta\varepsilon}) \mathcal{T}^{N-2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Inicialmente, vamos explorar a equação (34) para valores baixos. Para $N = 2$, temos

$$\begin{aligned} Z_2 &= \sum_{s_1 \in \{0,1,\dots,G\}} e^{-\beta\varepsilon(1-\delta_{s_1,0})} = e^{-\beta\varepsilon(1-\delta_{0,0})} + \sum_{s_1 \in \{1,\dots,G\}} e^{-\beta\varepsilon(1-\delta_{s_1,0})} \\ &= 1 + Ge^{-\beta\varepsilon} = (1 \ e^{-\beta\varepsilon} \ \dots \ e^{-\beta\varepsilon}) I_{G+1} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

uma vez que $\delta_{s_1,0} = 1$ se $s_1 = 0$ e $\delta_{s_1,0} = 0$ se $s_1 \neq 0$, além de que $\mathcal{T}^{2-2} = \mathcal{T}^0 = I_{G+1}$. Para $N = 3$, temos

$$\begin{aligned} Z_3 &= \sum_{\substack{s_1 \in \{0,1,\dots,G\} \\ s_2 \in \{0,1,\dots,G\}}} e^{-\beta\varepsilon(1-\delta_{s_1,0})} t_{s_1,s_2} = \sum_{s_2 \in \{0,1,\dots,G\}} t_{0,s_2} + e^{-\beta\varepsilon} \sum_{\substack{s_1 \in \{1,\dots,G\} \\ s_2 \in \{0,1,\dots,G\}}} t_{s_1,s_2} \\ &= (t_{0,0} \ t_{0,1} \ \dots \ t_{0,G}) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} + e^{-\beta\varepsilon} \begin{pmatrix} t_{1,0} & t_{1,1} & \dots & t_{1,G} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ t_{G,0} & t_{G,1} & \dots & t_{G,G} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \\ (35) \quad &\stackrel{(31)}{=} (1 \ e^{-\beta\varepsilon} \ \dots \ e^{-\beta\varepsilon}) \mathcal{T} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Mostremos a validade da equação (34) para todo $N \geq 2$. Pela equação (32), temos

$$\begin{aligned}
Z_N &= \sum_{\substack{s_i \in \{0,1,\dots,G\} \\ i \in \{1,\dots,N-1\}}} e^{-\beta\varepsilon(1-\delta_{s_1,0})} \prod_{i=1}^{N-2} t_{s_i,s_{i+1}} \\
&= \sum_{\substack{s_i \in \{0,1,\dots,G\} \\ i \in \{2,\dots,N-1\}}} t_{0,s_2} \dots t_{s_{N-2},s_{N-1}} + e^{-\beta\varepsilon} \sum_{\substack{s_i \in \{0,1,\dots,G\} \\ i \in \{2,\dots,N-1\} \\ s_1 \in \{1,\dots,G\}}} t_{s_1,s_2} \dots t_{s_{N-2},s_{N-1}} \\
&\stackrel{(37)}{=} \sum_{s_{N-1} \in \{0,1,\dots,G\}} t_{0,s_{N-1}}^{(N-2)} + e^{-\beta\varepsilon} \sum_{\substack{s_1 \in \{1,\dots,G\} \\ s_{N-1} \in \{0,1,\dots,G\}}} t_{s_1,s_{N-1}}^{(N-2)} \\
&= \begin{pmatrix} t_{0,0}^{(N-2)} & t_{0,1}^{(N-2)} & \dots & t_{0,G}^{(N-2)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} + e^{-\beta\varepsilon} \begin{pmatrix} t_{1,0}^{(N-2)} & t_{1,1}^{(N-2)} & \dots & t_{1,G}^{(N-2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ t_{G,0}^{(N-2)} & t_{G,1}^{(N-2)} & \dots & t_{G,G}^{(N-2)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 1 & e^{-\beta\varepsilon} & \dots & e^{-\beta\varepsilon} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_{0,0}^{(N-2)} & t_{0,1}^{(N-2)} & \dots & t_{0,G}^{(N-2)} \\ t_{1,0}^{(N-2)} & t_{1,1}^{(N-2)} & \dots & t_{1,G}^{(N-2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ t_{G,0}^{(N-2)} & t_{G,1}^{(N-2)} & \dots & t_{G,G}^{(N-2)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \\
&\stackrel{(36)}{=} \begin{pmatrix} 1 & e^{-\beta\varepsilon} & \dots & e^{-\beta\varepsilon} \end{pmatrix} \mathcal{T}^{N-2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix},
\end{aligned}$$

em que usamos, na terceira igualdade, que para todo $k \geq 2$, vale

$$(37) \quad t_{s_1,s_{k+1}}^{(k)} = \sum_{\substack{s_i \in \{0,1,\dots,G\} \\ i \in \{2,\dots,k\}}} t_{s_1,s_2} \dots t_{s_k,s_{k+1}}.$$

A matriz \mathcal{T} tem três autovalores distintos, a saber $\lambda_1 = Ge^{-\beta\varepsilon}$, $\lambda_2 = 1$ e $\lambda_3 = 0$, calculados via núcleo da matriz $\mathcal{T} - \lambda I$. Os autovetores dos dois autovalores não nulos são v_1 e v_2 dados, respectivamente, por

$$(38) \quad v_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}, \quad v_2 = \begin{pmatrix} 1 - Ge^{-\beta\varepsilon} \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Os vetores $(1 \ e^{-\beta\varepsilon} \ \dots \ e^{-\beta\varepsilon})$ e $(1 \ 1 \ \dots \ 1)$ podem ser escritos na base de autovetores $\{v_1, v_2\}$, a saber

$$(39) \quad \begin{pmatrix} 1 \\ e^{-\beta\varepsilon} \\ \vdots \\ e^{-\beta\varepsilon} \end{pmatrix} = \frac{e^{-\beta\varepsilon} (1 - Ge^{-\beta\varepsilon}) - 1}{1 - Ge^{-\beta\varepsilon}} v_1 + \frac{1}{1 - Ge^{-\beta\varepsilon}} v_2,$$

$$(40) \quad \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{-Ge^{-\beta\varepsilon}}{1 - Ge^{-\beta\varepsilon}} v_1 + \frac{1}{1 - Ge^{-\beta\varepsilon}} v_2,$$

e como $\langle v_1, v_1 \rangle = \langle v_1, v_2 \rangle = \langle v_2, v_1 \rangle = G$ e $\langle v_2, v_2 \rangle = (1 - Ge^{-\beta\varepsilon})^2 + G$, temos

$$\begin{aligned} Z_N &\stackrel{(34)}{=} (1 \ e^{-\beta\varepsilon} \ \dots \ e^{-\beta\varepsilon}) \mathcal{T}^{N-2} \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \\ &\stackrel{(39),(40)}{=} \left\langle \frac{e^{-\beta\varepsilon} (1 - Ge^{-\beta\varepsilon}) - 1}{1 - Ge^{-\beta\varepsilon}} v_1 + \frac{1}{1 - Ge^{-\beta\varepsilon}} v_2, \mathcal{T}^{N-2} \left(\frac{-Ge^{-\beta\varepsilon}}{1 - Ge^{-\beta\varepsilon}} v_1 + \frac{1}{1 - Ge^{-\beta\varepsilon}} v_2 \right) \right\rangle \\ &= \left\langle \frac{e^{-\beta\varepsilon} (1 - Ge^{-\beta\varepsilon}) - 1}{1 - Ge^{-\beta\varepsilon}} v_1 + \frac{1}{1 - Ge^{-\beta\varepsilon}} v_2, \frac{-Ge^{-\beta\varepsilon}}{1 - Ge^{-\beta\varepsilon}} \mathcal{T}^{N-2}(v_1) + \frac{1}{1 - Ge^{-\beta\varepsilon}} \mathcal{T}^{N-2}(v_2) \right\rangle \\ &= \left\langle \frac{e^{-\beta\varepsilon} (1 - Ge^{-\beta\varepsilon}) - 1}{1 - Ge^{-\beta\varepsilon}} v_1 + \frac{1}{1 - Ge^{-\beta\varepsilon}} v_2, \frac{-Ge^{-\beta\varepsilon}}{1 - Ge^{-\beta\varepsilon}} \lambda_1^{N-2} v_1 + \frac{1}{1 - Ge^{-\beta\varepsilon}} \lambda_2^{N-2} v_2 \right\rangle \\ &= \left\langle \frac{e^{-\beta\varepsilon} (1 - Ge^{-\beta\varepsilon}) - 1}{1 - Ge^{-\beta\varepsilon}} v_1 + \frac{1}{1 - Ge^{-\beta\varepsilon}} v_2, \frac{(-Ge^{-\beta\varepsilon}) (Ge^{-\beta\varepsilon})^{N-2}}{1 - Ge^{-\beta\varepsilon}} v_1 + \frac{1}{1 - Ge^{-\beta\varepsilon}} v_2 \right\rangle \\ &= \frac{-(Ge^{-\beta\varepsilon})^{N-1} (1 - Ge^{-\beta\varepsilon}) e^{-\beta\varepsilon} + (Ge^{-\beta\varepsilon})^{N-1}}{(1 - Ge^{-\beta\varepsilon})^2} \langle v_1, v_1 \rangle + \frac{e^{-\beta\varepsilon} (1 - Ge^{-\beta\varepsilon}) - 1}{(1 - Ge^{-\beta\varepsilon})^2} \langle v_1, v_2 \rangle \\ &\quad - \frac{(Ge^{-\beta\varepsilon})^{N-1}}{(1 - Ge^{-\beta\varepsilon})^2} \langle v_2, v_1 \rangle + \frac{1}{(1 - Ge^{-\beta\varepsilon})^2} \langle v_2, v_2 \rangle \\ &= \frac{-(Ge^{-\beta\varepsilon})^N + (Ge^{-\beta\varepsilon})^{N+1} + Ge^{-\beta\varepsilon} - (Ge^{-\beta\varepsilon})^2 + (1 - Ge^{-\beta\varepsilon})^2}{(1 - Ge^{-\beta\varepsilon})^2} \\ &= \frac{(1 - (Ge^{-\beta\varepsilon})^N) (1 - Ge^{-\beta\varepsilon})}{(41) (1 - Ge^{-\beta\varepsilon})^2} = \frac{1 - (Ge^{-\beta\varepsilon})^N}{1 - Ge^{-\beta\varepsilon}}. \end{aligned}$$

Ou seja,

$$(42) \quad Z_N = \frac{1 - (Ge^{-\beta\varepsilon})^N}{1 - Ge^{-\beta\varepsilon}},$$

ou de modo alternativo,

$$(43) \quad Z_N = \frac{1}{1 - Ge^{-\beta\varepsilon}} (-\lambda_1^N + \lambda_2^N),$$

o que mostra que a função de partição pode ser escrita como uma combinação linear da N -ésima potência dos autovalores da matriz de transferência. No limite termodinâmico, resta somente o maior autovalor e, para $N \rightarrow \infty$, a pressão é dada por

$$(44) \quad f \equiv \frac{1}{N}F \equiv -\frac{1}{\beta N} \log Z_N = -\frac{1}{\beta} \log \max(\lambda_1, \lambda_2)$$

onde o logaritmo tem base natural. Para termos uma transição de fase, o que significa que a pressão, dado que os autovalores são positivos e funções analíticas de β , é não analítica em algum ponto, devemos ter dois autovalores se cruzando em certo β_c . Neste caso basta comparar λ_1 e λ_2 e descobrir que eles se cruzam em uma temperatura dada por $\beta_c = \frac{\log G}{\varepsilon}$ ou, de modo equivalente, $T_c = \frac{\varepsilon}{k \log G}$ (veja Figura 11). Em T_c , a derivada da energia livre é descontínua, implicando que temos uma transição de fase de primeira ordem. Note que $T_c = \frac{\varepsilon}{k \log G}$ é finito enquanto $G > 1$; para o caso não degenerado $G = 1$ (somente um estado aberto) a transição ocorre em $T = \infty$ ou, em outras palavras, não existe transição de fase.

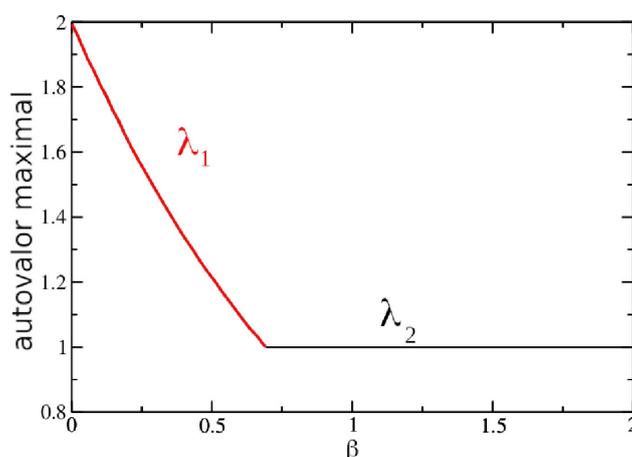


FIGURA 11. [2] Autovalores $\lambda_1 = Ge^{-\beta\varepsilon}$ e $\lambda_2 = 1$ em função de β , quando $G = 2$ e $\varepsilon = 1$; λ_1 e λ_2 se cruzam em $\beta_c = \log 2$, havendo, portanto, transição de fase de primeira ordem.

A matriz de transferência que encontramos no modelo de Ising unidimensional, composta por fatores de Boltzmann (exponenciais), é sempre estritamente positiva e, conseqüentemente, primitiva e analítica em β . Nessas condições, pelos Teoremas 2.1 e 2.2, não teremos uma transição de fase para qualquer $\beta > 0$. Conforme [2], a única maneira de escaparmos da hipótese do teorema de Perron-Frobenius é atribuindo uma energia infinita a algumas configurações, dando origem a entradas nulas na matriz, que podem ou não ser irredutíveis. Este é exatamente o caso no modelo de Kittel.

É importante perceber que a quebra da hipótese de irreduzibilidade não garante o cruzamento de autovalores: de fato, a matriz de transferência do modelo de Kittel para o caso não degenerado, $G = 1$, também é redutível, uma vez que $t_{1,2}^{(k)} = 0$ para qualquer $k \geq 1$, e o cruzamento de autovalores ocorre apenas em $\beta = 0$ (ou temperatura infinita), como já explicado, produzindo a analiticidade do autovalor maximal (daí a pressão) para qualquer temperatura finita.

5. DISCUSSÃO E CONSIDERAÇÕES FINAIS

Apresentamos resultados sobre o tratamento de transições de fase utilizando matrizes de transferência e o Teorema de Perron-Frobenius, exemplificando tal técnica com o modelo de Ising, e mostrando porque não há transição de fase, e com o modelo de Kittel, no qual há transição de fase em geral.

Uma vez que modelo de Kittel não satisfaz completamente nas hipóteses do Teorema de Perron-Frobenius - o que acontece pois a n -ésima potência de sua matriz de transferência ainda conta com entradas nulas, seja qual for o n - este apresenta transição de fase conforme o número de configurações do seu espaço de estados, a saber, se o espaço de estados tiver apenas dois estados (fechado e aberto), o modelo não apresenta transição de fase, todavia se houver mais estados (diferentes estados para distintas forma de abertura, por exemplo), o modelo apresenta transição de fase. Em outros termos, como a n -ésima potência de sua matriz de transferência tem entradas nulas, para qualquer que seja o n , não há garantias de um único autovalor maximal por parte do Teorema de Perron-Frobenius.

APÊNDICE A. TEOREMA DE PERRON-FROBENIUS

Nesse apêndice apresentaremos a demonstração do Teorema de Perron-Frobenius (Teorema 2.1) baseada em [14]. No Lema seguinte provamos um argumento que se faz necessário na demonstração do Teorema 2.1.

Lema A.1. *Dados $z_1, \dots, z_s \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$, se*

$$(45) \quad \left| \sum_{j=1}^s z_j \right| = \sum_{j=1}^s |z_j|,$$

então os argumentos desses números complexos são iguais, isto é,

$$(46) \quad \arg z_1 = \arg z_2 = \dots = \arg z_s.$$

Demonstração. O lema nada mais é do que a condição de igualdade na desigualdade triangular generalizada para um número qualquer de argumentos. Mostraremos por indução sobre s . Para $s = 2$ o lema é a desigualdade triangular conhecida: se $z, w \in \mathbb{C}$ são não nulos então $|z + w| \leq |z| + |w|$, com igualdade realizada se, e somente se, $\arg z = \arg w$, ou seja, $w = \lambda z$ com $\lambda > 0$.

Para $s \geq 3$ segue de (45) que

$$(47) \quad \sum_{j=1}^s |z_j| = \left| \sum_{j=1}^s z_j \right| \leq \left| \sum_{j=1}^{s-1} z_j \right| + |z_s| \leq \sum_{j=1}^s |z_j|,$$

de modo que

$$(48) \quad \sum_{j=1}^s |z_j| = \left| \sum_{j=1}^{s-1} z_j \right| + |z_s|,$$

e então

$$(49) \quad \sum_{j=1}^{s-1} |z_j| = \left| \sum_{j=1}^{s-1} z_j \right|.$$

Assumamos como hipótese de indução que $\arg z_1 = \arg z_2 = \dots = \arg z_{s-1}$ e provemos que a igualdade vale também para $\arg z_s$. Pela hipótese de indução, existem $w \in \mathbb{C}$ e $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{s-1} > 0$ tais que $z_j = \lambda_j w$ para $1 \leq j \leq s-1$. Pondo $\lambda = \lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_{s-1}$, podemos reescrever (45) como

$$(50) \quad \left| \sum_{j=1}^s z_j \right| = |\lambda w + z_s| = |\lambda w| + |z_s|,$$

e a desigualdade triangular para $s = 2$ fornece $\arg z_s = \arg \lambda w = \arg w = \arg z_j$ para $1 \leq j \leq s-1$, já que $\lambda > 0$. ■

Uma vez provado o Lema, podemos prosseguir para a demonstração do Teorema 2.1. A notação utilizada para vetores não negativos será $x \geq 0$, o que significa que $x_j \geq 0$ em cada componente do vetor x . Ainda, a notação $|x|$ para um vetor x se refere ao vetor $(|x_1|, \dots, |x_s|)$.

Demonstração do Teorema 2.1. (i) Seja $\tau \in \mathbb{C}$ um autovalor de M cujo módulo é maximal, isto é, $|\lambda| \leq |\tau|$ para qualquer autovalor λ de M . Se $y \in \mathbb{C}^s$ é o autovetor associado a τ então como $My = \tau y$ temos $\tau y_i = \sum_{j=1}^s m_{ij} y_j$ para todo i e $|\tau| |y_i| \leq \sum_{j=1}^s m_{ij} |y_j|$ uma vez que as entradas da matriz M são não-negativas. Assim

$$|\tau| \leq \min_{\{i: y_i \neq 0\}} \frac{\sum_{j=1}^s m_{ij} |y_j|}{|y_i|}.$$

Considere agora a função r , definida para vetores não-negativos de \mathbb{R}^s e dada por

$$r(x) = \min_{\{i: x_i \neq 0\}} \frac{\sum_{j=1}^s m_{ij} x_j}{x_i}$$

para $x \in \mathbb{R}^s$ com $x \neq 0$. Esta função r é semi-contínua superiormente e homogênea no conjunto $\{x \in \mathbb{R}^s \setminus \{0\}, x \geq 0\}$ de modo que o supremo

$$\theta = \sup_{\substack{x \geq 0 \\ x \neq 0}} r(x) = \sup_{\substack{x \geq 0 \\ \|x\|=1}} r(x)$$

existe e é realizado, uma vez que $\{x \geq 0 : \|x\| = 1\}$ é compacto (veja Exercício 21 do Capítulo II de [16]). Como

$$\min_{\{i: x_i \neq 0\}} \frac{\sum_{j=1}^s m_{ij} x_j}{x_i} \leq \theta$$

para todo $x \geq 0$, temos $\theta \geq |\tau| > 0$. Vamos provar que θ é um autovalor. Escrevendo

$$\theta = \min_{\{i: y_i \neq 0\}} \frac{\sum_{j=1}^s m_{ij} y_j}{y_i}$$

para algum $y \geq 0$ com $\|y\| = 1$, se $z = My - \theta y$ for não nulo, temos

$$M(M^k y) - \theta M^k y = M^k z > 0$$

onde $M^k > 0$ por ser M primitiva. Assim, pondo $x = M^k y$, teremos $\theta x < Mx$ e portanto $\theta x_i < \sum_{j=1}^s m_{ij} x_j$ para todo i , o que contradiz a nossa hipótese. Dessa forma, $My = \theta y$ e θ é um autovalor positivo tal que $|\lambda| \leq \theta$ para qualquer outro autovalor λ de M . Suponha agora que λ é um autovalor de M com $|\lambda| = \theta$. Se $My = \lambda y$ então $\theta|y| = |My| \leq M|y|$ e os argumentos anteriores garantem que $M|y| = \theta|y|$, de onde vem

$$M^k|y| = \theta^k|y| = |M^k y|$$

e, para todo i ,

$$\left| \sum_{j=1}^s m_{ij}^{(k)} y_j \right| = \sum_{j=1}^s m_{ij}^{(k)} |y_j|.$$

Pelo Lema A.1, as componentes y_j de y tem todas o mesmo argumento, $e^{i\phi}$ digamos, teremos $y = |y|e^{i\phi}$, logo se multiplicarmos o vetor y por $e^{-i\phi}$ vem $ye^{-i\phi} = |y|e^{i\phi}e^{-i\phi} = |y|$, ou seja, o resultado é um autovetor positivo correspondente a λ , e assim λ é positivo e $\lambda = \theta$.

- (ii) Mostramos em (i), para o autovalor dominante θ e um vetor qualquer y não negativo tal que $My \geq \theta y$, que o vetor $|y|$ é um autovetor positivo associado a θ .
- (iii) Começaremos mostrando que a multiplicidade geométrica de θ é um, ou seja, que $\dim \ker(M - \theta I) = 1$. Supondo que haja dois vetores, x e y , linearmente independentes em $\ker(M - \theta I)$, pelo item (ii) temos que x e y são vetores positivos, ou seja, ambos não têm nenhuma componente nula e pondo $z = y_1 x - x_1 y$ onde x_1 e y_1 são a primeira componente de x e y respectivamente, temos que a primeira componente de z é nula pois $z_1 = y_1 x_1 - x_1 y_1 = 0$. Logo por (ii) ou z é autovetor positivo de M ou $z = 0$; como $z_1 = 0$ segue que z não pode ser positivo, assim $z = 0$, o que mostra que existe uma combinação linear nula não trivial de x e y , uma vez que $x_1 > 0$ e $y_1 > 0$, e daí segue que x e y são linearmente dependentes, uma contradição com a hipótese. Assim, a dimensão do núcleo de $M - \theta I$ é um.

Ainda devemos mostrar que a multiplicidade algébrica de θ é um. Para isso, vamos provar que $\ker(M - \theta I) = \ker(M - \theta I)^2$. Claramente $\ker(M - \theta I) \subset \ker(M - \theta I)^2$ pois se $Mx = \theta x$ para algum x então

$$(51) \quad M^2 x = M(Mx) = M(\theta x) = \theta Mx = \theta^2 x.$$

Para mostrar que a igualdade é válida, vamos supor que existe $y \in \ker(M - \theta I)^2 \setminus \ker(M - \theta I)$ e mostrar que isto não é possível. Nessas condições,

$M^2y = \theta^2y$ mas $My \neq \theta y$, logo

$$(52) \quad (M - \theta I)^2y = (M - \theta I)[(M - \theta I)y] = 0$$

e daí $(M - \theta I)y \in \ker(M - \theta I)$. Como $\dim \ker(M - \theta I) = 1$, temos que $(M - \theta I)y$ é múltiplo de algum vetor $x \in \ker(M - \theta I)$, ou seja, $(M - \theta I)y = tx$ para algum $t \neq 0$ que por simplicidade tomaremos como sendo um (a rigor, basta escolher $\frac{y}{t}$ ao invés de y), logo

$$(53) \quad My = \theta y + x$$

e para todo $n \geq 1$, vale

$$(54) \quad M^n y = \theta^n y + n\theta^{n-1}x.$$

Vamos provar a equação (54) por indução. Uma vez que já temos o resultado para $n = 1$ na equação (53), supomos para $n = k$, ou seja, $M^k y = \theta^k y + k\theta^{k-1}x$, e vamos mostrar para $n = k + 1$. De fato,

$$\begin{aligned} M^{k+1}y &= M(M^k y) \stackrel{(HI)}{=} M(\theta^k y + k\theta^{k-1}x) \\ &= \theta^k My + k\theta^{k-1}Mx \\ &\stackrel{(53)}{=} \theta^k(\theta y + x) + k\theta^{k-1}\theta x \\ &= \theta^{k+1}y + (k+1)\theta^k x. \end{aligned}$$

Assim, para qualquer $n \geq 2$ temos

$$(55) \quad M^n |y| = |M^n y| = |\theta^n y + n\theta^{n-1}x| \geq \theta^{n-1}(n|x| - \theta|y|).$$

Como $|x| \in \ker(M - \theta I)$ é autovetor positivo de M , existe um n_0 suficientemente grande tal que $n_0|x| - \theta|y| \geq \theta|y|$, e por (55), temos

$$(56) \quad M^{n_0} |y| \geq \theta^{n_0-1}(n_0|x| - \theta|y|) \geq \theta^{n_0}|y|.$$

Mas M^{n_0} , por sua vez, é uma matrix primitiva com θ^{n_0} sendo seu autovalor positivo dominante. Usando outra vez os itens (i) e (ii) temos $M^{n_0}|y| = \theta^{n_0}|y|$, logo

$$(57) \quad M^{n_0} y = \theta^{n_0} y.$$

Por hipótese, tínhamos $My \neq \theta y$, uma vez que $y \in \ker(M - \theta I)^2 \setminus \ker(M - \theta I)$, logo $My > \theta y$ ou $My < \theta y$. Suponha, sem perda de generalidade, que $My > \theta y$, e por indução supomos válida $M^n y > \theta^n y$, logo

$$M^{n+1}y = M(M^n y) \stackrel{HI}{>} \theta^n M(y) > \theta^{n+1}y,$$

e portanto, $M^n y \neq \theta^n y$ para todo $n \in \mathbb{N}$, o que contradiz a equação (57). Assim $\ker(M - \theta I)^2 \setminus \ker(M - \theta I) = \emptyset$ e $\ker(M - \theta I)^2 = \ker(M - \theta I)$, o que mostra o resultado. ■

AGRADECIMENTOS

O autor agradece ao revisor anônimo pelos diversos apontamentos que ajudaram a qualificar o trabalho e ao professor Michel Spira que indicou uma prova mais direta e contundente para o Lema A.1.

REFERÊNCIAS

- [1] Blythe, R. A. e Evans, M. R., The Lee-Yang theory of equilibrium and nonequilibrium phase transitions, *Brazilian Journal of Physics*, **33** (2003), p. 464-475.
- [2] Cuesta, J.A. and Sánchez, A., General non-existence theorem for phase transitions in one-dimensional systems with short range interactions, and physical examples of such transitions, in *Journal of Statistical Physics*, **115** (2004), p. 869-893.
- [3] Daley, D. J., Gani, J., A deterministic general epidemic model in a stratified population, in *Probability, Statistics and Optimization*, (Wiley, 1994), p. 117-132.
- [4] Feller, W., *An Introduction to Probability Theory and Its Applications*, Vol. 1, (Wiley, 1950).
- [5] Friedli, S. and Velenik, Y. *Statistical Mechanics of Lattice Systems: A Concrete Mathematical Introduction*, (Cambridge University Press, 2017).
- [6] Frobenius, F. G., Über Matrizen aus nicht negativen Elementen, in *S. B. Preuss Acad. Wiss. Berlin*, **25** (1912), p. 456-477.
- [7] Kato, S., *Perturbation Theory for Linear Operators*, vol. 132 of *Grundlehren der mathematischen Wissenschaften*. (Springer-Verlag, 1980).
- [8] Keyfitz, N., *Applied Mathematical Demography*, 2nd ed., (Springer-Verlag, 1977).
- [9] Kittel, C., Phase Transition of a Molecular Zipper, in *American Journal of Physics*, **37**, (1969), p. 917-920.
- [10] MacCluer, C. R., *Boundary Value Problems and Orthogonal Expansions*. (IEEE Press, 1994).
- [11] MacCluer, C. R., The Many Proofs and Applications of Perron's Theorem, *SIAM Review*, **42** n. 3 (2000) p. 487-498.
- [12] Onsager, L., Crystal Statistics I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition, in *Physical Review*, **65** (1944), p. 117-149.
- [13] Perron, O., Zur Theorie der Matrizes, *Math. Ann.* **64**, **25** (1907), p. 248-263.
- [14] Queffelec, M., *Substitution Dynamical Systems - Spectral Analysis*, (Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, 2010).
- [15] Rudin, W., *Principle of Mathematical Analysis*, 3 ed. (McGraw-Hill, 1976).
- [16] Rudin, W., *Real and Complex Analysis*, 3 ed. (McGraw-Hill, 1986).
- [17] Salinas, S., *Introdução a Física Estatística*, 2 ed. (Edusp, 2018).
- [18] Seneta, E., *Nonnegative Matrices and Markov Chains*, 2 ed. (Springer-Verlag, 1981).
- [19] Takayama, A., *Mathematical Economics*. (Dryden Press, 1974).
- [20] Trapp, C., Schenkelberger, M. and Ott, A., Stability of double-stranded oligonucleotide DNA with a bulged loop: a microarray study, *BMC Biophysics*, **4** n. 20 (2011).

UNIVERSIDADE FEDERAL DA FRONTEIRA SUL
 AVENIDA EDMUNDO GAIEVISKY, SN
 REALEZA, PR

Email address: everton.artuso@uffs.edu.br