

Instituto de Física Teórica
Universidade Estadual Paulista

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

IFT-M.003/13

Estudo sobre a teoria de vínculos de Hamilton-Jacobi

Natália Tenório Maia

Orientador

Dr. Bruto Max Pimentel Escobar

Março de 2013

Agradecimentos

- Agradeço a minha querida família - minha mãe Linda Tenório, meu pai Fernando Maia e meu irmão Fernando Júnior - por ter acompanhado pacientemente todo meu trajeto pela Ciência, dando-me suporte financeiro, emocional e moral.
- Agradeço muito ao Prof. Dr. Bruto Max Pimentel Escobar por ter me aceitado gentilmente em seu grupo de pesquisa e por sempre ter me apoiado em momentos difíceis.
- Agradeço ao Dr. Mário Cezar Bertin e ao Dr. Carlos Valcárcel Flores pelas enriquecedoras discussões sobre os assuntos abordados neste trabalho.
- Agradeço ao meu amigo Danilo Ruy por ter me ajudado a solucionar problemas na edição do trabalho.
- Agradeço ao CNPq pelo apoio financeiro.

Resumo

A teoria de Hamilton-Jacobi geralmente é apresentada como uma extensão da teoria de Hamilton através das transformações canônicas. No entanto, o matemático Constantin Carathéodory mostrou que essa teoria, sua existência e validade, independem do formalismo hamiltoniano. Neste trabalho, apresentaremos a abordagem de Carathéodory para a teoria de Hamilton-Jacobi. Partindo desse procedimento, construiremos uma teoria de vínculos para que se possa resolver problemas com vínculos involutivos e não-involutivos. Para isso, analisaremos a integrabilidade das equações e introduziremos a operação dos *parênteses generalizados* que, no lugar do parênteses de Poisson, passará a descrever a dinâmica de sistemas vinculados. Mostraremos uma aplicação dessa teoria de vínculos no modelo BF da teoria de campos. Para finalizar, trataremos da Termodinâmica Axiomática de Carathéodory e também da teoria de Hamilton-Jacobi na Termodinâmica, o que é válido para ilustrar a grande abrangência desse formalismo.

Palavras Chaves: Princípios Variacionais; Teoria de Hamilton-Jacobi; Sistemas Vinculados.

Áreas do conhecimento: Mecânica Clássica; Teoria de Campos; Termodinâmica.

Abstract

The Hamilton-Jacobi theory is usually presented as an extension of the Hamilton's theory through the canonical transformations. However, the mathematician Constantin Carathéodory showed this theory, its existence and validity, is independent of the Hamiltonian formalism. In this work, we present the Caratheodory's approach to the Hamilton-Jacobi theory. From this procedure, we build a theory of constraints which can solve problems with involutive and non-involutive constraints. For this, we analyze the integrability of the equations and introduce the operation of the *generalized brackets* that, instead of Poisson brackets, will describe the dynamics of constrained systems. We show an application of this theory in BF model of the field theory. Finally, we will discuss the Carathéodory's Axiomatic Thermodynamics and also show the Hamilton-Jacobi theory in Thermodynamics, which is valid to illustrate the wide coverage of this formalism.

Key words: Variational Principles; Hamilton-Jacobi Theory; Constrained Systems.

Knowledge Area: Classical Mechanics; Field Theory; Thermodynamics.

Sumário

Introdução	3
1 Revisão da Mecânica Clássica	6
1.1 Base conceitual	6
1.2 Princípios variacionais	8
1.2.1 Princípio de d'Alembert	8
1.2.2 Princípio de Hamilton	9
1.2.3 Princípio de Weiss	11
1.3 Transformações canônicas e funções geradoras	13
2 Teoria de Hamilton-Jacobi por Carathéodory	15
2.1 Lagrangianas equivalentes	15
2.2 Equação de Hamilton-Jacobi	17
2.3 Equações de movimento	18
3 Teoria de Hamilton-Jacobi para sistemas com vínculos	23
3.1 Dinâmica de sistemas vinculados	23
3.2 Integrabilidade	28
3.3 Parênteses generalizados	30
3.4 Exemplos	33
4 Modelo BF	43
4.1 Modelo BF	44
4.2 Teoria de Hamilton-Jacobi no Modelo BF	47
4.2.1 Parênteses Generalizados	48
4.2.2 Equações características	49
5 Termodinâmica	51
5.1 Conceitos da Termodinâmica	51
5.2 Termodinâmica Axiomática	53
5.3 Teoria de Hamilton-Jacobi na Termodinâmica	55
5.3.1 Equações Características	58
5.4 Equação de Hamilton-Jacobi na Termodinâmica	58
Conclusão	64
Referências bibliográficas	66

Introdução

O Universo é essencialmente dinâmico. Todos os fenômenos da Natureza têm origem no movimento de algum corpo. Quando falamos de estática, no sentido literal da palavra, na verdade estamos falando de uma situação aproximada ou idealizada. No intuito de entender o movimento dos corpos, estudamos a Mecânica. Ela é a primeira das ciências da Natureza a usar a Matemática na descrição de seus fenômenos. Iniciaremos este trabalho abordando a Mecânica Clássica. Esta, como toda ciência, passou por várias formulações, entre as quais as mais notáveis são: mecânica de Newton, mecânica de Euler e Lagrange e a mecânica de Hamilton. Costuma-se, nos estudos acadêmicos, partir da mecânica newtoniana, que utiliza vetores para descrever a dinâmica de um sistema, em seguida é apresentada a mecânica lagrangiana que parte de princípios variacionais. Na sequência, estuda-se a mecânica hamiltoniana, que é capaz de analisar sistemas onde não há conservação de energia. Posteriormente, estuda-se a teoria de Hamilton-Jacobi (HJ), que também provê as equações de movimento de um sistema físico e abre portas para novas análises. Mostraremos neste trabalho a aplicabilidade da teoria de HJ não só na Mecânica Clássica, mas também na Teoria de Campos e na Termodinâmica.

No primeiro capítulo, revisaremos inicialmente alguns conceitos da Mecânica Clássica para no final apresentar a teoria de transformações canônicas, mas atentaremos em especial para os *princípios variacionais*, que são a base da Mecânica Analítica, em que se estruturam a teoria de HJ e tantas outras.

A idéia de que a Natureza segue um *princípio de mínimo esforço* é de origem muito antiga. No ano 75, por exemplo, Heron de Alexandria propôs que a luz segue sempre o caminho mais curto ao se propagar em um meio homogêneo. O *princípio da mínima ação* é pela primeira vez apresentado por Maupertuis em 1744 em seu estudo da Ótica, assunto bem discutido em [1]. No mesmo ano, Euler estabelece o *princípio da mínima ação* (ou *princípio da ação estacionária*) para a Mecânica, mas válido somente para o caso de energia constante. Posteriormente, temos o *princípio de d'Alembert* que se baseia em trabalhos virtuais, apresentado com propriedade em [2]. E, como abordagem global da ação, surge em 1834 o *princípio de Hamilton* que, por sua vez, se baseia na minimização da ação pela trajetória física. Nesse princípio, chega-se às equações de Euler-Lagrange que descrevem a dinâmica do sistema físico e é possível também chegar à lei de conservação da energia. Para tanto, Hamilton considera que os extremos da trajetória são fixos. Em 1938, Weiss [3] partiu do princípio da mínima ação, mas permitiu que os extremos da trajetória variassem, sendo assim pôde descrever a dinâmica do sistema e ainda analisar suas simetrias. No capítulo 1, no entanto, apresentaremos apenas os princípios de d'Alembert, Hamilton e Weiss, para não dispersarmos a atenção sobre o mais importante do trabalho que é a teoria de vínculos de HJ.

A teoria de HJ descreve a dinâmica de um sistema através da solução de uma equação diferencial parcial de primeira ordem, a chamada *equação de Hamilton-Jacobi*. A partir dela, obtém-se as informações necessárias para descrever como evolui um sistema físico. Mesmo

que não haja uma solução completa, a teoria de HJ nos possibilita conhecer as quantidades conservadas de um determinado sistema. A fim de comparação, consideremos um sistema com n graus de liberdade. Para descrever sua dinâmica através da teoria lagrangiana, deve-se resolver n equações diferenciais de segunda ordem, que são as equações de Euler-Lagrange para as n coordenadas generalizadas. Se for usada a teoria hamiltoniana, será necessário que se resolva $2n$ equações diferenciais de primeira ordem que são as equações canônicas para as coordenadas generalizadas e os momentos conjugados. A teoria de HJ ganha em simplicidade já que é necessário que se resolva uma única equação diferencial parcial de primeira ordem, e muitas vezes possibilita o uso de separação de variáveis, o que torna ainda mais fácil a resolução. No entanto, o objetivo principal deste trabalho não é discorrer sobre a teoria de HJ como já é conhecida dos livros Mecânica Clássica. Aqui abordaremos essa teoria da maneira como foi formulada por Carathéodory para depois apresentarmos uma teoria de vínculos de HJ.

Constantin Carathéodory foi um matemático que fez importantes contribuições, entre outras, na teoria de equações diferenciais parciais e no cálculo variacional. No capítulo 2 apresentaremos seu trabalho para a teoria de HJ [4], em que ele utiliza o *método das lagrangianas equivalentes* para chegar à equação de HJ e com o *método das características* encontra as equações de movimento. Poderemos ver no desenvolvimento do capítulo que se trata de uma teoria essencialmente lagrangiana, pois os momentos generalizados não serão tomados como variáveis independentes das coordenadas, suposição esta fundamental ao formalismo hamiltoniano.

Mostraremos no capítulo 3 que a teoria de HJ possui uma maneira natural de tratar sistemas com vínculos, o que foi desenvolvido primeiramente por Güller [5], e podemos ver sua aplicação no estudo da partícula não-relativística em espaços curvos [6], no modelo sigma $O(3)$ não-linear [7], no modelo de Schwinger [8], no modelo de Proca [9], na gravitação bidimensional de Polyakov [10] e na gravitação teleparalela [11]. Para sistemas com vínculos, deixamos de lidar com apenas uma equação para lidar com um sistema de equações de HJ. Ao analisar a integrabilidade desse conjunto de equações, podemos construir uma nova álgebra que descreve a dinâmica de um sistema com vínculos, a qual é dada pelos *parênteses generalizados*, o que foi desenvolvido em [12] e [13]. Essa teoria assim construída serve para solucionar problemas com vínculos involutivos ou não-involutivos [14]. A estrutura dos parênteses generalizados foi usada no estudo da dinâmica do Plano Nulo [15], do campo de Yang-Mills topologicamente massivo [16], da gravitação em duas dimensões [17] e da gravitação linearizada [18], assim como no estudo do modelo Auto-Dual [19]. Houve outros trabalhos para tratar a teoria de vínculos de HJ com lagrangianas de ordens superiores em [20] e [21], e também para sistemas de Berezin [22]. Existem outras teorias que tratam sistemas com vínculos, sendo a teoria de Dirac [23] talvez a mais conhecida. Outro importante trabalho para teoria de vínculos, vale dizer, foi feito por Bergmann [24].

No capítulo 4 aplicaremos a teoria de vínculos de HJ em teoria de campos, especificamente no modelo BF bidimensional [25]. Este modelo tem sido usado no estudo da gravitação tendo em vista a sua equivalência com o modelo de Jackiw-Teitelboim em duas dimensões [26]. No desenvolvimento do capítulo, faremos uso dos resultados que provê o princípio de Weiss para

analisar as simetrias do modelo. Provaremos que as equações de movimento obtidas usando a teoria de vínculos de HJ são compatíveis com os resultados obtidos pela equação de Euler-Lagrange para o modelo BF.

No capítulo 5 discutiremos um pouco sobre outro trabalho de Carathéodory, trata-se da Termodinâmica Axiomática. Carathéodory foi um dos pioneiros nesta área e sua contribuição mais notável foi ter usado a teoria de expressões pffafianas para formular a segunda lei da Termodinâmica, assunto bem discutido em [27] e [28]. Após apresentarmos de forma breve essa formulação, mostraremos como a teoria de HJ também está presente na Termodinâmica quando se usa geometria de contato [29]. Apresentaremos dois exemplos em que se pode encontrar a equação de HJ, que são: o *gás de Van der Waals* e o *ferromagneto de Curie-Weiss*.

Capítulo 1

Revisão da Mecânica Clássica

1.1 Base conceitual

A idéia básica da mecânica vetorial, a mecânica de Newton, é descrever o movimento a partir da análise das *forças* e dos *momentos*. A relação entre essas quantidades é dada por:

$$\vec{F}_i = \frac{d\vec{p}_i}{dt} \quad (1.1)$$

Para um sistema de n partículas, $i = 1, \dots, n$. Se a massa é constante, essa equação se torna:

$$\vec{F}_i = m_i \frac{d^2 \vec{x}_i}{dt^2} \quad (1.2)$$

Assim a descrição do movimento de um sistema mecânico na formulação newtoniana se resume à resolução de equações diferenciais ordinárias de segunda ordem.

A introdução do conceito primordial de *energia cinética*, feita por Leibniz, ofereceu à Mecânica uma quantidade física escalar como alternativa ao momento, que por sua vez é uma quantidade vetorial. Isso levou ao conceito de *função trabalho* (posteriormente substituído pelo conceito de *energia potencial*), fazendo com que Leibniz fosse o primeiro a abrir as portas à Mecânica Analítica, que é a base para os estudos de equilíbrio e movimento. É interessante notarmos o quão revolucionárias as idéias dessa nova mecânica deveria parecer: determinar o movimento, que é um fenômeno direcionado, a partir de duas quantidades escalares, isto é, a energia cinética e a função trabalho. A palavra “analítica” de mecânica analítica vem do termo matemático “análise”, que se refere à aplicação dos princípios do cálculo infinitesimal em problemas de matemática pura e aplicada. Problemas analíticos de movimento requerem uma generalização do conceito original de coordenadas de Descartes. Foi Lagrange que em seus trabalhos mostrou que qualquer conjunto de parâmetros que possam caracterizar a posição de um sistema mecânico pode ser escolhido como um conjunto de coordenadas. Conjuntos como esses são chamados de *coordenadas generalizadas*, que são denotadas pela letra q . A linguagem pictórica de geometria de n dimensões possibilita estender a mecânica de uma única massa pontual para um sistema mecânico arbitrariamente complicado, que pode ser substituído

por um único ponto para o estudo de seu movimento. O espaço que contém este ponto não é mais o espaço físico comum, mas é um espaço abstrato, chamado de *espaço de configurações*, onde a dimensão é tão grande quanto se necessite. Em vista da arbitrariedade das coordenadas, um conjunto de coordenadas generalizadas pode ser transformado em outro conjunto. Essa transformação de coordenadas pode ser concebida geometricamente como um mapeamento de um espaço de n dimensões nele mesmo. O mapeamento não preserva ângulos e distâncias, linhas retas tornam-se curvas. No entanto, em regiões infinitesimais, na vizinhança de um ponto, todos os mapeamentos ficam "endireitados": linhas retas são mapeadas para linhas retas, linhas paralelas para linhas paralelas e a razão de volumes é preservada. Duas grandes vantagens de usar a mecânica analítica ao invés da vetorial são: lidamos com quantidades escalares no lugar de quantidades vetoriais e usamos coordenadas generalizadas.

Euler e Lagrange fundaram as bases da Mecânica Analítica ao estudarem as condições necessárias para obter um valor estacionário da ação, que era dada pela integral no tempo da *vis viva* (força viva), que equivale ao dobro da energia cinética [2]. A condição necessária e suficiente para que uma função F de n variáveis tenha um valor estacionário em um certo ponto P é que as n derivadas parciais de F com respeito a todas as n variáveis sejam nulas no ponto P . Depois de satisfazer as condições para um valor estacionário, o critério posterior para um extremo depende do sinal da segunda derivada. Um extremo requer que o sinal da segunda derivada permaneça o mesmo para qualquer possível deslocamento virtual infinitesimal (positivo para um mínimo e negativo para um máximo). O extremo de uma função requer um valor estacionário apenas para deslocamentos reversíveis. Na fronteira do espaço de configurações, onde a variação da posição não é reversível, um extremo é possível sem que haja valor estacionário.

O cálculo variacional considera mudanças virtuais infinitesimais de uma função $y = f(x)$. A variação δy se refere a uma mudança arbitrária infinitesimal do valor de y no ponto x . Quando estudado em detalhe, pode-se ver que o processo de variação virtual revela duas propriedades: a variação e a diferenciação são permutáveis, tal como a variação e a integração.

Consideremos uma curva $y(x)$ e denotemos sua variação com respeito ao parâmetro x por $y' = \frac{dy}{dx}$. Euler e Lagrange, independentemente, mostraram que a integral

$$\int_a^b F(y, y', x) dx \quad (1.3)$$

tem valor estacionário, sobre uma curva $y(x)$ com extremos fixos, quando

$$\frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dx} \frac{\partial F}{\partial y'} = 0. \quad (1.4)$$

Posteriormente, Hamilton estudou as condições para minimizar a ação partindo do princípio de d'Alembert - que será apresentado na próxima seção - e obteve que a ação de um sistema físico deve ser dada por

$$W = \int L(q, \dot{q}, t) dt, \quad (1.5)$$

em que $L = T - V$ é a diferença entre as energias cinética e potencial e $\dot{q} = \frac{dq}{dt}$. Chamamos L de *função lagrangiana*.

1.2 Princípios variacionais

Iniciaremos esta seção com o *princípio de d'Alembert*, que é de fundamental importância para a evolução da Mecânica tal qual a conhecemos hoje. Em seguida, apresentaremos o *princípio de Hamilton* já partindo da ação como sendo a integral da função lagrangiana no tempo e assim obter as equações de Euler-Lagrange e as equações canônicas. Omitiremos os cálculos que explicitam a ponte entre o princípio de d'Alembert e o princípio de Hamilton por questão de prioridades para o presente trabalho, no entanto isso está feito de forma clara em [2]. Por último, apresentaremos o *princípio de Weiss* - o mais recente entre os três - que será de fundamental importância no desenvolvimento do capítulo 4, onde estudaremos o modelo BF.

1.2.1 Princípio de d'Alembert

O primeiro princípio variacional que encontramos na Mecânica é o princípio do trabalho virtual que, por sua vez, controla o equilíbrio de um sistema mecânico e é fundamental para o desenvolvimento posterior da mecânica analítica. O trabalho virtual está relacionado a um deslocamento virtual. Esse princípio assegura que:

Um dado sistema mecânico estará em equilíbrio somente se o trabalho virtual total de todas as forças aplicadas se anularem.

Enquanto na estática os problemas de sistemas de número finito de graus de liberdade levam a equações algébricas que podem ser resolvidas por substituições e eliminações, na dinâmica os problemas levam a equações diferenciais. d'Alembert estendeu a aplicabilidade do princípio do trabalho virtual da estática para a dinâmica através da introdução do conceito "força de inércia" proveniente da lei de Newton:

$$\begin{aligned} \vec{F} &= m\vec{a} \\ \vec{F} - m\vec{a} &= 0. \\ \vec{I} &= -m\vec{a}, \\ \vec{F} + \vec{I} &= 0. \end{aligned}$$

Chamamos $\vec{I}$ de "força de inércia". A última das equações acima pode ser interpretada da seguinte maneira: a adição da força de inércia à força aplicada no sistema produz equilíbrio. O critério para o equilíbrio de um sistema arbitrário de forças é que o trabalho virtual de todas

as forças seja nulo. Como os deslocamentos envolvidos para a determinação do trabalho são virtuais, esse critério se aplica tanto para massas em repouso quanto para massas em movimento.

O princípio de d'Alembert para um sistema mecânico arbitrário é:

Qualquer sistema de forças está em equilíbrio se adicionarmos as forças de inércia às forças aplicadas.

O trabalho virtual a ser considerado é o da "força efetiva", definida como a soma das forças aplicadas com as forças de inércia:

$$\vec{F}_k^e = \vec{F}_k + \vec{I}_k \quad (1.6)$$

O princípio de d'Alembert pode ser então reescrito:

O trabalho virtual das forças efetivas é nulo para todas as variações reversíveis que satisfaçam as dadas condições cinemáticas:

$$\sum_k \vec{F}_k^e \cdot \delta \vec{r}_k \equiv \sum_k (\vec{F}_k - m_k \vec{a}_k) \cdot \delta \vec{r}_k = 0. \quad (1.7)$$

As condições cinemáticas nem sempre têm a forma de relações definidas entre as coordenadas. Se elas têm, chamamo-lhes de condições *holonômicas*. Mas, ocasionalmente, a condição pode ser posta somente como uma relação entre as diferenciais das coordenadas sem qualquer chance de transformá-la em uma relação finita, e condições como estas são chamadas de condições *não-holonômicas*. O princípio de d'Alembert é aplicável tanto para sistemas holonômicos quanto para não-holonômicos. Sua desvantagem consiste no fato de que o trabalho virtual das forças de inércia é usualmente poligênico, ou seja, não pode ser reduzido a uma única função escalar. Diferentemente das forças aplicadas, que geralmente são monogênicas, as forças de inércia são poligênicas. Isto faz com que este princípio não seja uma boa escolha quando do uso de coordenadas curvilíneas. O princípio da mínima ação, por sua vez, é extremamente cabível neste caso, porém em problemas que envolvem o uso de variáveis cinemáticas (velocidades não-holonômicas) e transformação para referenciais em movimento, o princípio de d'Alembert é comparativamente mais flexível e, provavelmente, torna-se a melhor opção.

1.2.2 Princípio de Hamilton

Enquanto através do princípio de d'Alembert é possível estudar o sistema em cada instante de tempo do movimento, no princípio de Hamilton o movimento é tomado como um todo:

$$W = \int_{t_1}^{t_2} L(q^i, \dot{q}^i, t) dt. \quad (1.8)$$

Essa expressão é equivalente à integração no tempo da variação do trabalho virtual [2]. Para encontrar as equações de movimento, usaremos o princípio da mínima ação:

A curva que descreve a evolução do sistema físico, sobre a qual integramos L entre os pontos fixos definidos t_1 e t_2 , deve ser tal que a ação W tenha seu mínimo valor.

Esse princípio leva em conta que conhecemos o valor dos q^i em t_1 e t_2 e, como consequência disso, $\delta q^i(t_1) = 0$ e $\delta q^i(t_2) = 0$.

Encontrar o mínimo de uma integral é um problema de cálculo variacional, que lida com variações diferentes das variações do cálculo convencional. Uma variação virtual $\delta f(x)$ é infinitesimal e arbitrária, de forma que $f(x) + \delta f(x)$ produz uma nova função. Já uma variação $df(x)$ é infinitesimal e é devida à variação dx de sua variável independente. A fim de ilustrar com clareza a essência da variação virtual, consideremos o caso unidimensional: $L(q(t), \dot{q}(t), t)$. O princípio da mínima ação impõe que a dinâmica do sistema físico seja descrita por uma curva $q(t)$ que minimize a ação, ou seja, $\delta W = 0$. Como pode haver várias curvas que ligam os pontos t_1 e t_2 , necessita-se um estudo comparativo entre elas para que se encontre a curva que de fato minimiza a ação. Sendo assim, a variação virtual da curva $q(t)$ é feita com respeito a uma outra curva $\bar{q}(t)$: $\delta q = \bar{q}(t) - q(t)$.

Vemos assim que a essência desse processo depende somente da variação de q quando t é mantido constante. Então, no estudo que se seguirá do princípio de Hamilton, sempre teremos que $\delta t = 0$.

Para encontrar as condições necessárias para que a ação seja mínima, analisaremos a sua variação:

$$\delta W = \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q^i} \delta q^i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \delta \dot{q}^i \right) dt. \quad (1.9)$$

Usando integração por partes, temos:

$$\int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \delta \dot{q}^i dt = \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \delta q^i \right]_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \delta q^i dt. \quad (1.10)$$

Lembrando que nos extremos t_1 e t_2 a variação das posições é nula, resta que

$$\delta W = \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q^i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \right) \delta q^i dt. \quad (1.11)$$

Tendo em vista que as variações δq^i são arbitrárias, para que tenhamos $\delta W = 0$ devemos satisfazer

$$\frac{\partial L}{\partial q^i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} = 0, \quad (1.12)$$

que são as chamadas *equações de Euler-Lagrange*. Introduzindo uma nova definição,

$$p_i \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}, \quad (1.13)$$

podemos reescrever as equações de Euler-Lagrange como:

$$\dot{p}_i = \frac{\partial L}{\partial q^i}. \quad (1.14)$$

A quantidade p_i é chamada de *momento generalizado*. O motivo deste nome é que, quando resolvemos o caso para uma partícula livre, as quantidades p_1 , p_2 e p_3 , de acordo com a definição acima, são idênticas às componentes retangulares do momento linear $m\vec{v}$. Há uma transformação de Legrende que produz uma função que descreve a dinâmica do sistema físico similarmente como o faz a função lagrangiana, porém essa nova função, que chamamos de *hamiltoniana*, depende dos momentos em vez das velocidades. É ela dada por:

$$H = p_i \dot{q}^i - L. \quad (1.15)$$

Quando resolvemos (1.13) para $\dot{q}^i$ e substituimos na equação acima, podemos escrever H em termos apenas das posições, dos momentos e, se for o caso, do tempo:

$$H = H(q^i, \dots, q^n, p_1, \dots, p_n, t). \quad (1.16)$$

Usando (1.14) e (1.15), e assumindo que p_i independa de q^i , é fácil mostrar que

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}. \quad (1.17)$$

Também, diferenciando a expressão de H da transformação de Legrende, podemos identificar que:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}. \quad (1.18)$$

Estas duas últimas equações descrevem a dinâmica do sistema e são chamadas de *equações canônicas de Hamilton*.

1.2.3 Princípio de Weiss

O princípio de Weiss também busca encontrar as condições que tornem $\delta W = 0$. No entanto, ele não faz uso do cálculo variacional da forma como vimos na seção anterior, pois considera as variações da variável t . Com isso, modificaremos a notação da variação virtual, que agora será denotada por $\bar{\delta}$. Teremos que

$$\delta q^i = \bar{\delta} q^i + \dot{q}^i \delta t \quad (1.19)$$

expressa a variação da coordenada q^i devido tanto à mudança na sua forma (que se dá a tempo fixo) quanto à mudança gerada pela variação de sua variável independente t . Segue assim que a variação da ação é dada por

$$\delta W = \int \delta L dt + \int L \delta t = \int (\delta L + L \frac{d}{dt} \delta t) dt, \quad (1.20)$$

em que

$$\delta L = \frac{\partial L}{\partial t} \delta t + \frac{\partial L}{\partial q^i} \delta q^i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \delta \dot{q}^i. \quad (1.21)$$

Pela conhecida regra de comutação

$$[\frac{d}{dt}, \delta]q^i = \dot{q}^i \frac{d}{dt}\delta t, \quad (1.22)$$

temos

$$\delta \dot{q}^i = \frac{d}{dt}\delta q^i - \dot{q}^i \frac{d}{dt}\delta t. \quad (1.23)$$

Usando a equação (1.23) na equação (1.21), resulta

$$\delta L = \delta t [\frac{\partial L}{\partial t} + \frac{d}{dt}(\dot{q}^i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i})] + \delta q^i (\frac{\partial L}{\partial q^i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}) + \frac{d}{dt}(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \delta q^i - \dot{q}^i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \delta t). \quad (1.24)$$

Tendo em vista (1.13) e (1.15), definiremos

$$E_i \equiv \frac{\partial L}{\partial q^i} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}, \quad G \equiv p_i \delta q^i - H \delta t, \quad (1.25)$$

e com isso podemos usar o resultado da equação (1.24) na equação (1.20) para escrever

$$\delta W = \int [E_i \delta q^i + (\frac{dH}{dt} + \frac{\partial L}{\partial t}) \delta t + \frac{dG}{dt}] dt. \quad (1.26)$$

A quantidade E_i que introduzimos por questão de conveniência é a já conhecida expressão de Euler-Lagrange. Chamamos G de *gerador* e podemos notar que, em sua expressão, os coeficientes das variações δq^i e δt são as respectivas variáveis conjugadas p_i e H .

Podemos escrever a variação da ação em uma forma ainda mais compacta usando a variação a tempo fixo $\bar{\delta} q^i$:

$$\delta W = \int (E_i \bar{\delta} q^i + \frac{dG}{dt}) dt. \quad (1.27)$$

O gerador também pode ser reescrito como

$$G = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \bar{\delta} q^i + L \delta t. \quad (1.28)$$

Olhando para a variação da ação (1.27), definiremos o que será chamado daqui por diante de *termo de Lie*:

$$\Delta L = E_i \bar{\delta} q^i + \frac{dG}{dt}. \quad (1.29)$$

Quando nulo, esse termo passa a ser a *equação de Lie*. A variação da ação é, então, dada por

$$\delta W = \int_{t_1}^{t_2} \Delta L dt. \quad (1.30)$$

A condição $\Delta L = 0$ significa, mais que um valor estacionário, a invariância da ação sobre algum grupo específico de variação (veremos sua importância adiante, na análise do modelo

BF no capítulo 4). Observamos no termo de Lie que se as equações de Euler-Lagrange são satisfeitas, a única contribuição na variação da ação será dada pelo gerador nos pontos extremos:

$$\delta W = \int_{t_1}^{t_2} \frac{dG}{dt} dt = \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \delta q^i + L \delta t \right]_{t_1}^{t_2}. \quad (1.31)$$

E isto, enfim, é o que diz o princípio de Weiss: a curva que descreve a dinâmica de um sistema físico é tal que só produz contribuições nos termos de fronteira no funcional de ação.

1.3 Transformações canônicas e funções geradoras

Depois do formalismo de Hamilton, houve outras tentativas para simplificar a resolução das equações de movimento. Como não há um método direto de integração dessas equações diferenciais, uma maneira de contornar o problema é usar transformação de coordenadas, de modo que a hamiltoniana nesse novo conjunto de coordenadas se simplifique ao ponto de se tornar diretamente integrável. No entanto, devemos atentar para um importante detalhe. As equações lagrangianas são invariantes por transformações de coordenadas no espaço de configuração (espaço das coordenadas generalizadas), mas as equações canônicas hamiltonianas não são necessariamente invariantes por transformações arbitrárias no espaço de fase (espaço das coordenadas e dos momentos generalizados). Logo, as transformações de coordenadas que objetivam simplificar o problema no formalismo hamiltoniano, devem ser tais que tenhamos mantida a forma canônica das equações de movimento, com o intuito de que a ação permaneça minimizada. Quando obedecida essa condição, temos as chamadas *transformações canônicas*. A teoria que rege essas transformações é devida essencialmente a Jacobi.

Em uma transformação canônica, que fundamentalmente deve ser inversível, das variáveis (q, p) para (Q, P) , temos a consequente transformação de $H(q, p, t)$ para $K(Q, P, t)$:

$$\dot{q}^i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \longrightarrow \dot{Q}^i = \frac{\partial K}{\partial P_i} \quad (1.32)$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q^i} \longrightarrow \dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q^i} \quad (1.33)$$

Se as equações acima forem válidas, então as equações abaixo também devem ser:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} [p_i \dot{q}^i - H(q, p, t)] dt = 0, \quad (1.34)$$

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} [P_i \dot{Q}^i - K(Q, P, t)] dt = 0. \quad (1.35)$$

Uma condição suficiente para a validade simultânea é: a soma dos dois integrandos resulta na diferencial total de uma função arbitrária $\chi(q, p, t)$, como mostrado abaixo.

$$(p_i d\dot{q}^i - P_i d\dot{Q}^i) + (K - H) = d\xi, \quad (1.36)$$

pois quando esta equação for integrada no tempo, o lado direito resultará zero, já que na fronteira podemos fazer com que as variações de q e p sejam nulas. Chamamos ξ de *função geradora* da transformação canônica.

Temos um caso particular de transformação canônica que é fundamental para a teoria de HJ, como veremos a seguir. Tal transformação é gerada pela função abaixo:

$$S(q, P, t) = \xi(q, p(q, P, t), t). \quad (1.37)$$

Podemos deduzir da equação da diferencial de ξ , para este caso, que

$$p_i = \frac{\partial S}{\partial q^i}, \quad Q^i = \frac{\partial S}{\partial P_i}, \quad (1.38)$$

$$K(Q, P, t) = H(q, p, t) + \frac{\partial S}{\partial t}. \quad (1.39)$$

A mais importante consequência de uma transformação canônica é quando a hamiltoniana transformada K torna-se nula. Isso faz com que a solução das equações de movimento transformadas sejam triviais. Uma vez em mãos as soluções das equações transformadas, obter as soluções das equações de movimento originais torna-se um simples trabalho de substituição.

Se a função S é escolhida de modo que $K = 0$, temos uma equação diferencial parcial de primeira ordem nas $n + 1$ variáveis independentes, conhecida como a *equação de Hamilton-Jacobi*:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H(q, \frac{\partial S}{\partial q}, t) = 0. \quad (1.40)$$

A descrição da dinâmica de um sistema físico por esta equação é tão verdadeira quanto o é através das equações de Euler-Lagrange e das equações canônicas de Hamilton.

Capítulo 2

Teoria de Hamilton-Jacobi por Carathéodory

Geralmente a Teoria de HJ é apresentada nos livros como sendo obtida por transformações canônicas a partir da mecânica hamiltoniana. Então interpretamos a função S como uma função geradora de uma transformação canônica.

Carathéodory, diferentemente, usou a teoria das equações diferenciais de primeira ordem e a idéia de lagrangianas equivalentes para introduzir a função S e, posteriormente, definir a função H . A equação de HJ resulta naturalmente desses passos. Neste capítulo, apresentaremos este procedimento tentando ser o mais fiel possível ao que quis dizer o respeitável trabalho deste matemático. Usaremos na primeira parte deste capítulo a notação que Carathéodory usou em seu livro para denotar a derivada parcial de uma função F com respeito a uma de suas variáveis x , isto é, $\frac{\partial F}{\partial x} = F_x$.

2.1 Lagrangianas equivalentes

Para o entendimento completo desta seção, será preciso primeiramente introduzir dois conceitos: *extremo* e *vizinhança fechada*.

Extremo

No espaço de $(2n + 1)$ dimensões, consideraremos uma função ao menos duas vezes continuamente diferenciável denotada por $L(t, x^i, \dot{x}^i)$. Dizemos que uma curva $x^i(t)$ é um extremo da função L se, quando considerarmos as integrais

$$I = \int_{t_1}^{t_2} L(t, x^i, \dot{x}^i) dt, \quad (2.1)$$

$$\bar{I} = \int_{t_1}^{t_2} L(t, \bar{x}^i, \frac{d\bar{x}^i}{dt}) dt, \quad (2.2)$$

tivermos sempre que $I \geq \bar{I}$ ou $I \leq \bar{I}$.

Vizinhança fechada

Consideremos curvas $x^i(t)$ em um espaço de $n + 1$ dimensões, onde as coordenadas são $(t, x^1, \dots, x^n)$. Em um espaço de $2n + 1$ dimensões, definimos suas derivadas por

$$\dot{x}^i = \frac{dx^i}{dt}. \quad (2.3)$$

Dizemos que uma curva de comparação $\bar{x}^i(t)$ pertence a uma *vizinhança fechada* (ε, η) se pudermos sempre ter satisfeitas as condições abaixo:

$$|\bar{x}^i(t) - x^i(t)| < \varepsilon, \quad (2.4)$$

$$\left| \frac{d\bar{x}^i}{dt} - \dot{x}^i \right| < \eta, \quad (2.5)$$

em que $i = 1, \dots, n$. Assumiremos que todas as funções usadas acima e também adiante sejam definidas em um intervalo fechado $t_1 \leq t \leq t_2$.

Apresentaremos agora o *método das lagrangianas equivalentes*: dada a lagrangiana L de um sistema físico, podemos modificá-la de forma a obter um problema variacional equivalente, ou seja, uma mesma curva $x^i(t)$ será um extremo tanto da lagrangiana original quanto da lagrangiana modificada. Vejamos como isso procede.

Seja $S(t, x^1, \dots, x^n)$ uma função ao menos duas vezes diferenciável, definida no intervalo $t_1 \leq t \leq t_2$, como as demais funções. Assumamos que vale a identidade abaixo independentemente da curva que se escolha:

$$S^{(2)} - S^{(1)} = \int_{t_1}^{t_2} (S_t + S_{x^i} \dot{x}^i) dt. \quad (2.6)$$

Introduzamos uma nova lagrangiana da seguinte forma:

$$L^*(t, x^i, \dot{x}^i) = L(t, x^i, \dot{x}^i) + \frac{dS}{dt}. \quad (2.7)$$

Desse modo, se integrarmos L^* sobre duas curvas diferentes, obteremos duas quantidades diferentes, como mostrado abaixo:

$$I^* = I + (S^{(2)} - S^{(1)}), \quad J^* = J + (S^{(2)} - S^{(1)}). \quad (2.8)$$

Então, devido à identidade da função S , temos que

$$I^* - J^* = I - J. \quad (2.9)$$

Vemos assim que se uma dada curva é um extremo de L , também o é de L^* , resultando em problemas variacionais equivalentes.

Se usarmos a função S para construirmos uma função lagrangiana L^* que seja identicamente nula para uma dada curva $\psi^i(t)$, mas que seja positiva para qualquer curva $x^i(t)$ que pertença a

uma vizinhança fechada, então o problema variacional será especificamente encontrar um mínimo, isto é, encontrar uma curva que leve o valor de L^* e I^* a zero. Se ao contrário tivéssemos escolhido construir uma função L^* que obedecesse à condição $L^* < 0$ para qualquer curva que não seja um extremo, então nosso problema variacional seria especificamente encontrar um máximo.

Para este trabalho, escolheremos o problema variacional de minimizar I^* . Então devemos construir uma lagrangiana que obedeça às condições já citadas, que são

$$L^*(t, x^i, \psi^i) = 0, \quad (2.10)$$

$$L^*(t, x^i, \dot{x}^i) > 0. \quad (2.11)$$

Em suma, tendo em mãos a lagrangiana original do sistema físico, podemos construir uma nova lagrangiana que tenha as propriedades acima a partir da adição da derivada total de uma determinada função $S(t, x^i)$. Feito isso, o problema de encontrar um extremo para a integral I^* é simplificado, pois conhecemos o fato de o seu mínimo ter valor zero.

Caratheódory escreveu esses resultados como:

Teorema: Se é possível definir um sistema de funções continuamente diferenciáveis $\psi^i(t, x^j)$, em que $i, j = 1, \dots, n$, e também uma função pelo menos duas vezes continuamente diferenciável $S(t, x^j)$ para a qual

$$L(t, x^j, \psi^j) - S_t - S_{x^i} \psi^i \equiv 0 \quad (2.12)$$

sempre valha, assim como

$$L(t, x^j, \dot{x}^j) - S_t - S_{x^i} \dot{x}^i > 0 \quad (2.13)$$

sempre valha se as quantidades $|\dot{x}^j - \psi^j|$ forem suficientemente pequenas e não forem todas simultaneamente nulas, então as soluções das equações diferenciais parciais

$$\dot{x}^i = \psi^i(t, x^j) \quad (2.14)$$

serão mínimos do nosso problema variacional.

2.2 Equação de Hamilton-Jacobi

Vamos analisar a expressão abaixo:

$$L^*(t, x^j, \dot{x}^j) = L(t, x^j, \dot{x}^j) - \frac{\partial S}{\partial t} - \frac{\partial S}{\partial x^i} \dot{x}^i. \quad (2.15)$$

Todas as primeiras derivadas parciais desta expressão com respeito a $\dot{x}^j$ devem ser nulas quando fizermos $\dot{x}^i = \psi^i$. Lembrando que S é função apenas de t e x^i , vejamos no que essas derivadas resultam:

$$\left[\frac{\partial L^*}{\partial \dot{x}^i}\right]_{\dot{x}^i=\psi^i} = 0 \quad (2.16)$$

$$[L_{\dot{x}^i} - S_{t\dot{x}^i} - \frac{\partial}{\partial \dot{x}^i}(S_{x^j}\dot{x}^j)]_{\dot{x}^i=\psi^i} = 0 \quad (2.17)$$

$$[L_{\dot{x}^i} - S_{x^j} \frac{\partial \dot{x}^j}{\partial \dot{x}^i}]_{\dot{x}^i=\psi^i} = 0. \quad (2.18)$$

Temos então a conhecida relação:

$$\frac{\partial S}{\partial x^i} = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}^i} \equiv p_i. \quad (2.19)$$

Usando este resultado na equação (2.12), temos também

$$\frac{\partial S}{\partial t} = L(t, x^j, \psi^j) - p_i \psi^i. \quad (2.20)$$

Agora, se definirmos uma função $H(t, x^j, p_j) \equiv p_i \psi^i - L(t, x^j, \psi^j)$, a equação acima pode ser reescrita como

$$\frac{\partial S}{\partial t}(t, x^j) + H(t, x^j, p_j) = 0, \quad (2.21)$$

que é a conhecida *equação de Hamilton-Jacobi*.

2.3 Equações de movimento

Veremos agora como Carathéodory procedeu para chegar às equações de movimento usando o *método das características de Cauchy*.

Sejam duas funções contínuas pelo menos duas vezes diferenciáveis $F(x^1, \dots, x^n, y_1, \dots, y_n, z)$ e $S(x^1, \dots, x^n)$ de forma que quando temos

$$z = S(x^j), \quad y_i = \frac{\partial S(x^j)}{\partial x^i}, \quad (2.22)$$

implica em

$$F(x^1, \dots, x^n, \frac{\partial S}{\partial x^i}, \dots, \frac{\partial S}{\partial x^n}, S) = 0. \quad (2.23)$$

Vemos que se trata de uma equação diferencial parcial (EDP) de primeira ordem. Derivando F com respeito a x^i sobre uma superfície $S(x^i)$ que seja solução da equação acima, obtemos

$$\frac{\partial F}{\partial x^i} + \frac{\partial F}{\partial y_j} \frac{\partial^2 S}{\partial x^i \partial x^j} + \frac{\partial F}{\partial z} \frac{\partial S}{\partial x^i} = 0. \quad (2.24)$$

Consideraremos no espaço dos x^n uma curva arbitrária $x^i = x^i(t)$ que seja diferenciável. Diferenciando com respeito a t as expressões (2.22), temos

$$\dot{z} = \frac{\partial S}{\partial x^i} \dot{x}^i, \quad (2.25)$$

$$\dot{y}_i = \frac{\partial^2 S}{\partial x^j \partial x^i} \dot{x}^j. \quad (2.26)$$

Usando a expressão acima, reescrevamos a equação (2.24):

$$\left(\dot{y}_i - \frac{\partial^2 S}{\partial x^j \partial x^i} \dot{x}^j \right) + \frac{\partial F}{\partial x^i} + \frac{\partial F}{\partial y_j} \frac{\partial^2 S}{\partial x^i \partial x^j} + \frac{\partial F}{\partial z} \frac{\partial S}{\partial x^i} = 0. \quad (2.27)$$

Como S é suposta como sendo uma função pelos menos duas vezes continuamente diferenciável, ou seja,

$$\frac{\partial^2 S}{\partial x^j \partial x^i} = \frac{\partial^2 S}{\partial x^i \partial x^j}, \quad (2.28)$$

podemos ter

$$\dot{y}_i + \frac{\partial F}{\partial x^i} + \frac{\partial F}{\partial z} \frac{\partial S}{\partial x^i} = \frac{\partial^2 S}{\partial x^i \partial x^i} (\dot{x}^i - \frac{\partial F}{\partial y_i}). \quad (2.29)$$

Agora vamos dar um passo fundamental desse procedimento. Queremos encontrar a solução da EDP de primeira ordem $F(x^1, \dots, x^n, y_1, \dots, y_n, z) = 0$, o que significa encontrar as expressões para x^i , y_i e z . Temos expressões para y_i , z , $\dot{y}_i$, $\dot{z}$, mas não temos expressão para x^i e $\dot{x}^i$, o que não possibilita a resolução de (2.25) e (2.26). Como $x^i(t)$ é uma curva até então arbitrária, faremos com que $\dot{x}^i(t)$ obedeça à seguinte condição:

$$\dot{x}^i = \frac{\partial F}{\partial y_i}. \quad (2.30)$$

Com essa especificação, teremos agora

$$\dot{y}_i = -\frac{\partial F}{\partial x^i} - \frac{\partial F}{\partial z} \frac{\partial S}{\partial x^i}, \quad (2.31)$$

$$\dot{z} = \frac{\partial S}{\partial x^j} \frac{\partial F}{\partial y_j}. \quad (2.32)$$

Podemos dizer, então, que as $2n + 1$ funções $x^i(t)$, $y_i(t) = \frac{\partial S(x^j(t))}{\partial x^i}$ e $z(t) = S(x^j(t))$ são soluções do sistema de EDO

$$\dot{x}^i = \frac{\partial F}{\partial y_i}, \quad (2.33)$$

$$\dot{y}_i = -\frac{\partial F}{\partial x^i} - \frac{\partial F}{\partial z} y_i, \quad (2.34)$$

$$\dot{z} = \frac{\partial F}{\partial y_i} y_i. \quad (2.35)$$

Para ilustrar como x^i, y_i e z estão relacionados por esse sistema, consideremos um caso em que $i = 1, 2$.

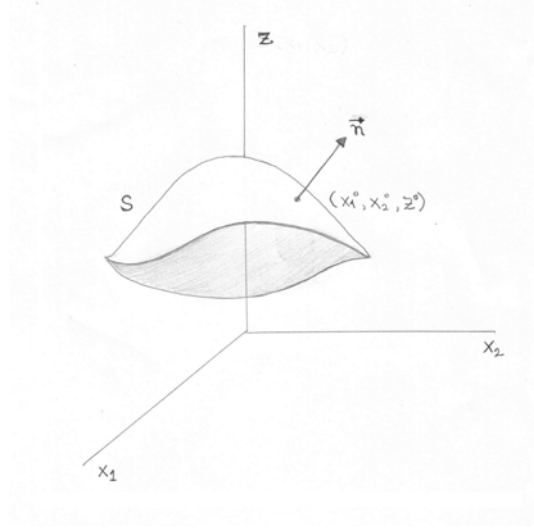


Figura 2.1: Exemplo bidimensional.

Seja

$$f = S(x^1, x^2) - z. \quad (2.36)$$

O vetor normal à superfície S é dado por

$$\vec{n} = \nabla f = \frac{\partial S}{\partial x^1} \hat{x}^1 + \frac{\partial S}{\partial x^2} \hat{x}^2 - \hat{z}. \quad (2.37)$$

Como $y_i = \frac{\partial S}{\partial x^i}$, então $\vec{n} = (y_1, y_2, -1)$.

Isso pode ser generalizado para quantas dimensões se queira. De modo geral, podemos dizer:

Se existe $z = S(x^i)$ que é solução de $F(x^j, \frac{\partial S}{\partial x^j}, S) = 0$ a qual contém o elemento de superfície (x^i, z) , então as curvas características $(x^i(t))$, que são soluções do sistema de EDO $\dot{x}^i$, devem se situar na superfície $z = S(x^i)$. As componentes normais à superfície são determinadas sobre as curvas $x^i(t)$ pelas funções $y_i(t)$.

Quando a EDP de primeira ordem em questão é a equação de HJ, o sistema de EDO nos provê as equações de movimento de um sistema físico. Adotaremos daqui por diante outra notação:

$$x^i = q^i(t), \quad x^0 = q^0 = t. \quad (2.38)$$

$$y_i = \frac{\partial S(q^j, t)}{\partial q^i} = p_i, \quad y_0 = \frac{\partial S(q^j, t)}{\partial t} = p_0. \quad (2.39)$$

$$F = H'(p_0, H_0) = p_0 + H(t, q^i, p_i) = 0. \quad (2.40)$$

Temos que estar atentos ao tomar as derivadas de F , pois agora é uma função que depende explicitamente de p_0 e H_0 , sendo que sua dependência em q^i é implícita. Sobre uma superfície $S(q^i, t)$ que seja solução da EDP, tomaremos a derivada de H' com respeito a q^i :

$$\frac{dH'}{dq^i} = \frac{\partial H'}{\partial p_0} \frac{dp_0}{dq^i} + \frac{\partial H'}{\partial H_0} \frac{dH_0}{dq^i} = 0 \quad (2.41)$$

$$\frac{\partial^2 S}{\partial q^i \partial t} + \frac{\partial H_0}{\partial q^i} + \frac{\partial H_0}{\partial p_j} \frac{\partial^2 S}{\partial q^i \partial q^j} = 0. \quad (2.42)$$

Derivando p_i com respeito a t , temos

$$\dot{p}_i = \frac{\partial^2 S}{\partial q^j \partial q^i} \dot{q}^j + \frac{\partial^2 S}{\partial t \partial q^i} \Rightarrow \dot{p}_i - \frac{\partial^2 S}{\partial q^j \partial q^i} \dot{q}^j - \frac{\partial^2 S}{\partial t \partial q^i} = 0. \quad (2.43)$$

Usando (2.43) em (2.42) temos

$$\dot{p}_i + \frac{\partial H_0}{\partial q^i} = \frac{\partial^2 S}{\partial q^j \partial q^i} (\dot{q}^j - \frac{\partial H_0}{\partial p_j}) = 0. \quad (2.44)$$

Da equação acima, fazendo com que

$$\dot{q}^i = \frac{\partial H_0}{\partial p_i}, \quad (2.45)$$

temos como consequência

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H_0}{\partial q^i}. \quad (2.46)$$

As equações (2.45) e (2.46) são chamadas de *equações canônicas*. A equação característica relativa a z pode ser obtida por uma simples derivação em t :

$$\dot{z} = \frac{dS}{dt} = \frac{\partial S}{\partial q^i} \dot{q}^i + \frac{\partial S}{\partial t} \quad (2.47)$$

$$\frac{dS}{dt} = p_i \frac{\partial H_0}{\partial p_i} + \frac{\partial S}{\partial t}. \quad (2.48)$$

O formalismo que Carathéodory usou para chegar tanto à equação de HJ quanto às equações canônicas é essencialmente lagrangiano, pois em nenhum momento foi necessário apelar para a condição de que os p 's sejam variáveis independentes dos q 's. Na verdade, foi necessário que se considerasse tal dependência para que o lado direito da equação (2.44) fosse bem definido,

ou seja, sendo $\frac{\partial^2 S}{\partial q^j \partial q^i} \neq 0$, teríamos motivo para especificar $\dot{q}^i = \frac{\partial H_0}{\partial p_i}$ e assim obter as equações características.

Capítulo 3

Teoria de Hamilton-Jacobi para sistemas com vínculos

Aqui usaremos o procedimento de Carathéodory para construir uma teoria de vínculos, ou seja, partiremos da equação de HJ e usaremos o método das características para chegar às equações de movimento de um sistema com vínculos. Para tais sistemas, a equação de HJ juntamente com os vínculos formarão um conjunto de EDP de HJ. Ao analisar a integrabilidade desse conjunto de equação, vemos que os vínculos podem ser classificados em *involutivos*, que são equações integráveis, e os *não-involutivos*, que são equações não-integráveis.

Para lidar com os vínculos não-involutivos, associaremos a cada um deles um parâmetro de forma que a dinâmica do sistema será descrita por uma nova álgebra: *os parênteses generalizados*. Esse procedimento foi apresentado em [14].

Ao final do capítulo solucionaremos três problemas bem conhecidos - o pêndulo simples, a partícula na esfera e o campo eletromagnético livre - para mostrar como a teoria funciona tanto para vínculos involutivos quanto não-involutivos.

3.1 Dinâmica de sistemas vinculados

O problema que envolve sistemas vinculados está relacionado ao fato de que a transição do formalismo lagrangiano para o formalismo hamiltoniano é falha, já que isso depende de a lagrangiana satisfazer a condição hessiana

$$\det \mathcal{W} \neq 0, \quad (3.1)$$

em que $\mathcal{W}$ é uma matriz cujos elementos são

$$w_{ij} = \frac{\partial p_i}{\partial \dot{q}^j} = \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}^j \partial \dot{q}^i}. \quad (3.2)$$

Se essa condição é satisfeita, as equações $p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}$ são inversíveis para as velocidades $\dot{q}^i$ e assim podemos escrever a hamiltoniana do sistema a partir da lagrangiana substituindo

essas pelos momentos p_i . Sistemas que cumprem com essa condição são chamados de *sistemas regulares*.

Sistemas que não obedecem a condição hessiana, por sua vez, são ditos *sistemas singulares*, caracterizados pela presença de vínculos. Mostraremos adiante que esses sistemas pressupõem a redução de graus de liberdade e que obedecem não só a uma, mas a um conjunto de equações de HJ. A partir deste, encontraremos as equações de movimento usando o método das características e discutiremos sobre as condições de integrabilidade dos vínculos.

Partiremos da equação que antecede a equação de HJ, quando ainda não definimos a função $H_0(t, q^j, p_j) \equiv p_i \dot{q}^i - L(t, q^j, \dot{q}_j)$,

$$\frac{\partial S}{\partial t} + p_i \dot{q}^i - L = 0, \quad (3.3)$$

em que

$$p_i = \frac{\partial S}{\partial \dot{q}^i}. \quad (3.4)$$

No caso de um sistema com vínculos, a lagrangiana não cumpre a condição hessiana, isto é,

$$\det \mathcal{W} = \det \left(\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{q}^i \partial \dot{q}^j} \right) = 0. \quad (3.5)$$

A matriz hessiana, por ser simétrica, é diagonalizável. Então, diagonalizada, a matriz hessiana singular é composta por duas submatrizes: uma com m autovalores não-nulos e outra com k autovalores nulos, sendo que $m + k = n$, assumindo que n seja a dimensão do espaço de configuração. A primeira submatriz é inversível, logo podemos escrever as velocidades em termos das posições e dos momentos:

$$p_a = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^a} \longrightarrow \dot{q}^a = \eta^a(q^i, p_b), \quad (3.6)$$

em que $a, b = 1, \dots, m$.

A segunda submatriz tem determinante nulo e portanto não pode haver inversão para as seguintes equações:

$$p_z = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^z}, \quad (3.7)$$

em que $z = 1, \dots, k$.

Estas equações são consideradas *vínculos* da teoria, que reescreveremos como:

$$H'_z \equiv p_z + H_z(q^i, \eta^a) = 0, \quad (3.8)$$

$$H_z \equiv -\frac{\partial L}{\partial \dot{q}^z}. \quad (3.9)$$

Suporemos L seja linear em $\dot{q}^z$, de modo que H_z não dependa dessas velocidades, embora essa dependência possa existir sem que a matriz hessiana seja inversível.

Feito essa nova denominação das velocidades, reescrevemos a equação (3.3):

$$\frac{\partial S}{\partial t} + p_a \eta^a + p_z \dot{q}^z - L = 0. \quad (3.10)$$

Agora analisando a derivada parcial dessa equação com respeito às velocidades não inversíveis, temos

$$\frac{\partial}{\partial \dot{q}^y} \left(\frac{\partial S}{\partial t} + p_a \eta^a + p_z \dot{q}^z - L \right) = p_y - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^y} = H'_y = 0. \quad (3.11)$$

Isto é, se os vínculos forem respeitados, os termos da equação (3.10) que originarão a função hamiltoniana canônica, que seria

$$H_0 \equiv p_a \eta^a + p_z \dot{q}^z - L, \quad (3.12)$$

não dependerão das velocidades não inversíveis. Logo, na região onde os vínculos são satisfeitos, a hamiltoniana canônica é bem definida, ou seja, ela depende apenas das posições e dos momentos (e eventualmente do tempo), como por definição deve ser.

Adotando a seguinte notação

$$p_0 \equiv \frac{\partial S}{\partial t}, \quad (3.13)$$

reescreveremos a equação (3.10):

$$H'_0 \equiv p_0 + H_0(q^i, \eta^a) = 0. \quad (3.14)$$

Assim, podemos unificar H'_0 e H'_z na seguinte forma:

$$H'_\alpha \equiv p_\alpha + H_\alpha(q^i, \eta^a), \quad (3.15)$$

em que $\alpha = 0, 1, \dots, k$. Esse sistema de equações é chamado de *sistema de EDP de Hamilton-Jacobi*.

Usaremos agora o método de Cauchy para encontrar as equações características desse sistema. Sejam as equações (3.15) escritas como funções explícitas das posições e dos momentos

$$H'_\alpha(q^b, q^\beta, p_b, p_\beta) = 0, \quad (3.16)$$

e sejam as condições

$$q^0 = t, \quad p_0 = \frac{\partial S(q^b, q^\beta)}{\partial q^0}, \quad (3.17)$$

$$p_\alpha = \frac{\partial S(q^b, q^\beta)}{\partial q^\alpha}, \quad (3.18)$$

$$p_a = \frac{\partial S(q^b, q^\beta)}{\partial q^a}, \quad (3.19)$$

lembrando que $\alpha, \beta = 0, 1, \dots, k$ são os índices relacionados aos vínculos e $a, b = 1, \dots, m$ são os índices relacionados às velocidades inversíveis.

Tomaremos a derivada de H'_α com respeito a q^a :

$$\frac{\partial H'_\alpha}{\partial q^a} + \frac{\partial H'_\alpha}{\partial p_\beta} \frac{dp_\beta}{dq^a} + \frac{\partial H'_\alpha}{\partial p_b} \frac{dp_b}{dq^a} = 0. \quad (3.20)$$

O caso que nos interessa é quando H'_α é função linear dos momentos p_α , como demanda a construção da teoria, haja vista a equação (3.8). Isso implica que

$$\frac{\partial H'_\alpha}{\partial p_\beta} = \delta_\alpha^\beta. \quad (3.21)$$

Então temos

$$\frac{dp_\alpha}{dq^a} = \frac{\partial^2 S}{\partial q^a \partial q^\alpha} = -\frac{\partial H'_\alpha}{\partial q^a} - \frac{\partial H'_\alpha}{\partial p_b} \frac{dp_b}{dq^a}. \quad (3.22)$$

Tomando as diferenciais

$$dp_a = \frac{\partial^2 S}{\partial q^b \partial q^a} dq^b + \frac{\partial^2 S}{\partial q^\alpha \partial q^a} dq^\alpha, \quad (3.23)$$

e usando (3.22), resulta em

$$dp_a = \frac{\partial^2 S}{\partial q^b \partial q^a} dq^b - \left(\frac{\partial H'_\alpha}{\partial q^a} + \frac{\partial H'_\alpha}{\partial p_b} \frac{\partial p_b}{\partial q^a} \right) dq^\alpha. \quad (3.24)$$

Agora se considerarmos que $p_z = -H_z$ na equação

$$p_0 + p_a \dot{q}^a + p_z \dot{q}^z - L = 0, \quad (3.25)$$

e derivarmos parcialmente com respeito a p_b , conseguimos chegar a

$$\frac{\partial H'_0}{\partial p_b} = \dot{q}^b - \frac{\partial H_z}{\partial p_b} \dot{q}^z = \dot{q}^b - \frac{\partial H'_z}{\partial p_b} \dot{q}^z. \quad (3.26)$$

Como $\dot{q}^0 = 1$, podemos inseri-lo na expressão acima multiplicando-o no lado esquerdo de maneira a possibilitar escrever o resultado em uma forma compacta:

$$dq^b = \frac{\partial H'_\alpha}{\partial p_b} dq^\alpha. \quad (3.27)$$

Usando (3.27) na equação (3.24), obtemos

$$dp_a = \frac{\partial p_a}{\partial q^b} \frac{\partial H'_\alpha}{\partial p_b} dq^\alpha - \left(\frac{\partial H'_\alpha}{\partial q^a} + \frac{\partial H'_\alpha}{\partial p_b} \frac{\partial p_b}{\partial q^a} \right) dq^\alpha. \quad (3.28)$$

Como $p_b = \frac{\partial S}{\partial q^b}$, e S é por suposição uma função pelo menos duas vezes continuamente diferenciável, temos que

$$\frac{\partial p_b}{\partial q^a} = \frac{\partial p_a}{\partial q^b}. \quad (3.29)$$

Usando essa relação em (3.28), podemos então escrever

$$dp_a = -\frac{\partial H'_\alpha}{\partial q^a} dq^\alpha. \quad (3.30)$$

Resta encontrar a equação característica relativa à função S . Para isso, basta tomar a diferencial da função e teremos:

$$dS = \frac{\partial S}{\partial q^a} dq^a + \frac{\partial S}{\partial q^\alpha} dq^\alpha = (p_a \frac{\partial H}{\partial p_a} - H_\alpha) dq^\alpha, \quad (3.31)$$

onde usamos (3.27).

Por fim, para o caso de um sistema com vínculos, o sistema de equações características é

$$dq^a = \frac{\partial H'_\alpha}{\partial p_a} dq^\alpha, \quad (3.32)$$

$$dp_a = -\frac{\partial H'_\alpha}{\partial q^a} dq^\alpha, \quad (3.33)$$

$$dS = (p_a \frac{\partial H}{\partial p_a} - H_\alpha) dq^\alpha. \quad (3.34)$$

A solução das duas primeiras equações dá origem a uma congruência de curvas parametrizadas por q^α no espaço de fase de dimensão $2m$ das variáveis (q^a, p_a) . Como consequência disso, no espaço de configuração, a trajetória dinâmica fica restrita às variáveis q^a , ou seja, a trajetória é descrita por $q^a = q^a(q^z, t)$, sendo q^z parâmetros em condições de igualdade a t . Assim, chamaremos o conjunto de parâmetros q^α de *variáveis independentes* do sistema. Por consistência, observáveis físicos devem ser funções desse *espaço de fase reduzido*, e sua dinâmica descrita por:

$$dF = \frac{\partial F}{\partial q^\alpha} dq^\alpha + \frac{\partial F}{\partial q^a} dq^a + \frac{\partial F}{\partial p_a} dp_a. \quad (3.35)$$

Usando as equações características, fica

$$dF = \frac{\partial F}{\partial q^\alpha} dq^\alpha + \left(\frac{\partial F}{\partial q^a} \frac{\partial H'_\alpha}{\partial p_a} - \frac{\partial F}{\partial p_a} \frac{\partial H'_\alpha}{\partial q^a} \right) dq^\alpha. \quad (3.36)$$

Como $\frac{\partial F}{\partial p_\alpha} = 0$ e $\frac{\partial H'_\alpha}{\partial p_\alpha} = 1$, podemos definir os parênteses de Poisson em termos de todas as variáveis:

$$\{F, G\} = \frac{\partial F}{\partial q^{\alpha'}} \frac{\partial G}{\partial p_{\alpha'}} - \frac{\partial F}{\partial p_{\alpha'}} \frac{\partial G}{\partial q^{\alpha'}}, \quad (3.37)$$

em que $\alpha' = 0, 1, \dots, n$. Assim, a dinâmica de um observável pode ser escrita de forma simplificada pela equação

$$dF = \{F, H'_\alpha\} dq^\alpha. \quad (3.38)$$

3.2 Integrabilidade

Uma vez que temos um sistema de EDP, precisamos saber quais condições devem ser obedecidas para que haja solução para esse sistema, ou seja, para que ele seja integrável.

Trazendo à memória o teorema de Frobenius [32], sabemos que para que uma família de hiperplanos seja integrável, cada par de vetores que pertença a um desses planos deve satisfazer a

$$[X_i, X_j] = C_{ij}^k X_k, \quad (3.39)$$

ou seja, a operação de comutação de quaisquer dois vetores que pertençam a um certo plano resultará um terceiro vetor pertencente ao mesmo plano. Isso implica que esses vetores são linearmente independentes entre si.

No caso do sistema de EDP de HJ, podemos reescrevê-lo com $k + 1$ campos de vetores linearmente independentes X_α agindo na função S :

$$H'_\alpha = X_\alpha(S) = \chi_\alpha^{\alpha'} \frac{\partial S}{\partial q^{\alpha'}} = 0, \quad (3.40)$$

Para encontrar uma expressão para as componentes desses vetores, vamos analisar a equação (3.38) para q^a :

$$dq^a = \{q^a, H'_\alpha\} dq^\alpha = \frac{\partial H'_\alpha}{\partial p_a} dq^\alpha. \quad (3.41)$$

Mas quando inserimos (3.40) em (3.38), temos

$$dq^a = \{q^a, \chi_\alpha^{\alpha'} \frac{\partial S}{\partial q^{\alpha'}}\} dq^\alpha = \chi_\alpha^{\alpha'} dq^\alpha. \quad (3.42)$$

E por comparação, obtemos

$$\chi_\alpha^a = \frac{\partial H'_\alpha}{\partial p_a}. \quad (3.43)$$

Por coerência com a forma das equações de HJ, devemos ter $\chi_\alpha^z = \delta_\alpha^z$.

Se agora consideramos que o vetor X_α age sobre uma função F do espaço de configuração, isto é, uma função que depende apenas das coordenadas, teremos como resultado:

$$X_\alpha(F) = \chi_\alpha^a \frac{\partial F}{\partial q^a} = \frac{\partial H'_\alpha}{\partial p_a} \frac{\partial F}{\partial q^a} = \{F, H'_\alpha\}. \quad (3.44)$$

E se dois vetores agirem sobre F , então teremos

$$X_\alpha[X_\beta(F)] = X_\alpha(\{F, H'_\beta\}) = \{\{F, H'_\beta\}, H'_\alpha\}. \quad (3.45)$$

Tendo em vista esses últimos resultados, vamos investigar o comutador de dois vetores agindo em F :

$$[X_\alpha, X_\beta](F) = \{\{F, H'_\beta\}, H'_\alpha\} - \{\{F, H'_\alpha\}, H'_\beta\}. \quad (3.46)$$

Usando a identidade de Jacobi, é verdade que

$$\{\{F, H'_\beta\}, H'_\alpha\} = -\{\{H'_\alpha, F\}, H'_\beta\} - \{\{H'_\beta, H'_\alpha\}, F\}. \quad (3.47)$$

Quando substituimos (3.47) em (3.46), sobra

$$[X_\alpha, X_\beta](F) = -\{F, \{H'_\alpha, H'_\beta\}\}. \quad (3.48)$$

Agora, olhando para a condição de integrabilidade,

$$[X_\alpha, X_\beta](F) = C_{\alpha\beta}^\gamma X_\gamma(F) = C_{\alpha\beta}^\gamma \{F, H'_\gamma\}, \quad (3.49)$$

vemos que, para que os vetores fechem uma álgebra de Lie, precisamos ter

$$\{F, \{H'_\alpha, H'_\beta\}\} = -C_{\alpha\beta}^\gamma \{F, H'_\gamma\}, \quad (3.50)$$

ou seja,

$$\{H'_\alpha, H'_\beta\} = c_{\alpha\beta}^\gamma H'_\gamma. \quad (3.51)$$

Aqui vemos que a álgebra obedecida pelos vetores X_α para a integrabilidade do sistema $X_\alpha(S)$ implica em outra álgebra que deve ser obedecida pelos vínculos H'_α : em lugar do comutador, temos os parênteses de Poisson.

Por coerência com o sistema físico que estamos trabalhando, devem ser sempre válidas as equações $H'_\alpha = 0$, o que implica que a condição de integrabilidade para este caso é ainda mais específica:

$$\{H'_\alpha, H'_\beta\} = 0. \quad (3.52)$$

Isto implicará em mais outra condição, pois tendo em vista a equação (3.38), teremos

$$dH'_\alpha = 0, \quad (3.53)$$

o que significa que os vínculos devem se manter inalterados durante a trajetória dinâmica. Temos, então, três condições equivalentes que determinam a integrabilidade do sistema de EDP de HJ, que são as equações (3.51), (3.52) e (3.53).

Quando lidamos com um sistema físico que possui vínculos, podemos cair em diferentes situações ao analisar a integrabilidade do sistema de EDP de HJ.

Em geral, temos três possibilidades:

- (a) Todos os vínculos obedecem à condição (3.51): sistema completamente integrável.
- (b) Nenhum dos vínculos obedece à condição (3.51): sistema completamente não-integrável.
- (c) Parte dos vínculos obedecem à condição (3.51): sistema parcialmente integrável.

Quando os vínculos obedecem às condições de integrabilidade, eles são chamados de *vínculos involutivos*. Opostamente temos os *vínculos não-involutivos*, que não obedecem às condições de integrabilidade. Neste último caso, o sistema de EDP de HJ não tem solução imediata do ponto de vista da condição de Frobenius. No entanto, existe uma maneira de contornar esse problema redefinindo a dinâmica do sistema, ou seja, definindo o que chamamos de *Parênteses Generalizados de Poisson*, como veremos a seguir.

3.3 Parênteses generalizados

Vamos supor que temos em mãos um sistema completo de EDP de HJ:

$$H'_\alpha = 0, \quad \alpha = (0, 1, \dots, k). \quad (3.54)$$

Escrevendo a equação de evolução para um dos vínculos, separando o parâmetro temporal dos demais, teremos

$$dH'_\alpha = \{H'_\alpha, H'_0\}dt + \{H'_\alpha, H'_z\}dx^z, \quad (3.55)$$

e impondo a condição de integrabilidade (3.53), resulta

$$\{H'_\alpha, H'_0\}dt + \{H'_\alpha, H'_z\}dx^z = 0. \quad (3.56)$$

Vamos definir uma matriz antissimétrica M formada pelos parênteses de Poisson dos vínculos H'_z , ou seja, $\{H'_x, H'_z\} \equiv M_{xz}$, o que nos permite escrever

$$M_{xz}dx^z = -\{H'_x, H'_0\}dt. \quad (3.57)$$

Se o sistema todo de EDP de HJ é não-involutivo, como o caso (b) que citamos no final da seção anterior, a matriz M é regular e, portanto, possui inversa. Podemos então escrever que

$$dx^z = -(M^{-1})^{zx} \{H'_x, H'_0\} dt. \quad (3.58)$$

Com este resultado, a equação de evolução se torna

$$dF = \{F, H'_0\} dt + \{F, H'_z\} dx^z = [\{F, H'_0\} - \{F, H'_z\} (M^{-1})^{zx} \{H'_x, G\}] dt. \quad (3.59)$$

Neste ponto é que definimos o que chamamos de *parênteses generalizados*:

$$\{F, G\}^* \equiv \{F, G\} - \{F, H'_z\} (M^{-1})^{zx} \{H'_x, G\}. \quad (3.60)$$

Sendo a equação de evolução dada assim por

$$dF = \{F, H'_0\}^* dt. \quad (3.61)$$

Depois que os parênteses generalizados são construídos, todos os vínculos se tornam involutivos nessa nova descrição dinâmica.

Consideremos agora o caso (c), em que parte dos vínculos seja não-involutiva. Suponhamos que a matriz M seja singular de posto $r \leq k$, ou seja, há r vínculos não-involutivos. Neste caso, vamos escrever a equação (3.57) da seguinte forma:

$$M_{x\bar{a}} dx^{\bar{a}} + M_{x\bar{z}} dx^{\bar{z}} = -\{H'_x, H'_0\} dt, \quad (3.62)$$

em que $\bar{a} = 1, \dots, r$ são os vínculos não-involutivos e $\bar{z} = r+1, \dots, k$ são os vínculos involutivos. Dividiremos a equação acima em dois conjuntos, um para cada um dos dois tipos de vínculo:

$$M_{\bar{b}\bar{a}} dx^{\bar{a}} + M_{\bar{b}\bar{z}} dx^{\bar{z}} = -\{H'_{\bar{b}}, H'_0\} dt, \quad (3.63)$$

$$M_{\bar{x}\bar{a}} dx^{\bar{a}} + M_{\bar{x}\bar{z}} dx^{\bar{z}} = -\{H'_{\bar{x}}, H'_0\} dt. \quad (3.64)$$

Do primeiro conjunto, temos

$$M_{\bar{b}\bar{a}} dx^{\bar{a}} = -\{H'_{\bar{b}}, H'_0\} dt - \{H'_{\bar{b}, H'_z}\} dx^{\bar{z}} = -\{H'_{\bar{b}}, H'_\theta\} dx^{\bar{\theta}}, \quad (3.65)$$

sendo que $\bar{\theta} = 0, r+1, \dots, k$. Como a submatriz formada pelos vínculos não-involutivos é regular, podemos escrever

$$dx^{\bar{a}} = -(M^{-1})^{\bar{a}\bar{\theta}} \{H'_{\bar{b}}, H'_\theta\} dx^{\bar{\theta}}. \quad (3.66)$$

Assim, podemos eliminar r variáveis independentes, isto é, podemos escrever a equação de evolução independentemente das variações dessas r variáveis:

$$dF = \{F, H'_a\} dx^{\bar{a}} + \{F, H'_\theta\} dx^\theta = \{F, H'_\theta\}^* dx^{\bar{\theta}}, \quad (3.67)$$

em que temos

$$\{F, G\}^* \equiv \{F, G\} - \{F, H'_a\}(M^{-1})^{\bar{a}\bar{b}}\{H'_b, G\}. \quad (3.68)$$

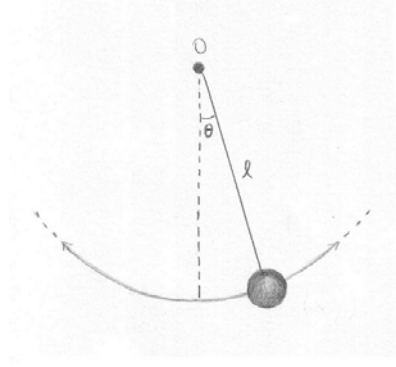
Os vínculos involutivos logicamente não influenciam nos parênteses generalizados.

Para os casos (b) e (c) que acabamos de analisar, supôs-se que todos os vínculos do sistema já eram conhecidos. No entanto, para que seja possível formar os parênteses generalizados geralmente precisamos adicionar novos vínculos ao sistemas. Isso acontece quando impomos a condição de integrabilidade (3.53) aos vínculos iniciais. Veremos isso acontecer em todos os exemplos a seguir.

3.4 Exemplos

Resolveremos a seguir dois problemas de Mecânica com vínculos não-involutivos, que são o pêndulo simples e a partícula em uma esfera. Depois, resolveremos um problema de Teoria de Campos com vínculos involutivos, que é o campo eletromagnético livre.

Pêndulo Simples



Inicialmente, temos para este sistema a restrição $\psi = r - l = 0$. Para implementá-la na lagrangiana, faremos uso de um multiplicador de lagrange u :

$$L = \frac{m}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2) + mgr \cos \theta + u\psi.$$

Para usarmos o formalismo de HJ que desenvolvemos, construiremos um espaço de configuração estendido, onde as variáveis são as coordenadas r e θ e também o parâmetro u . Vemos que os momentos conjugados são

$$p_r = m\dot{r}, \quad p_\theta = mr^2\dot{\theta},$$

e como não há velocidade relativa a u , o momento p_u é nulo. A hamiltoniana canônica é facilmente obtida:

$$H_0 = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\theta^2}{2mr^2} - mg \cos \theta - u\psi.$$

Os vínculos iniciais são

$$\begin{aligned} H'_0 &= p_0 + H_0 = 0, \\ H'_1 &= p_u = 0. \end{aligned}$$

A equação de evolução é dada por

$$dF = \{F, H'_0\}dt + \{F, H'_1\}du.$$

Testaremos agora a integrabilidade dos vínculos:

$$dH'_0 = \{H'_0, H'_1\}du = \{-u\psi, p_u\}du = -\psi du.$$

Devemos considerar um novo vínculo, $H'_2 = \psi = 0$, a fim de que o sistema se torne integrável.

$$H'_2 = \{H'_2, H'_0\}dt + \{H'_2, H'_1\}du = \{\psi, \frac{p_r^2}{2m}\}dt = \frac{p_r}{m}dt.$$

Novamente adicionaremos um novo vínculo: $H'_3 = \frac{p_r}{m} = 0$.

$$\begin{aligned} dH'_3 &= \{H'_3, H'_0\}dt + \{H'_3, H'_1\}du = \left\{\frac{p_r}{m}, \frac{p_\theta^2}{2mr^2} - mgr \cos \theta - u\psi\right\}dt \\ &= \frac{p_\theta^2}{m^2r^3} + g \cos \theta + \frac{u}{m}dt. \end{aligned}$$

Outro novo vínculo: $H'_4 = \frac{p_\theta^2}{m^2r^3} + g \cos \theta + \frac{u}{m} = 0$.

$$\begin{aligned} dH'_4 &= \{H'_4, H'_0\}dt + \{H'_4, H'_1\}du = \left\{g \cos \theta + \frac{p_\theta^2}{m^2r^3}, \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\theta^2}{2mr^2} - mgr \cos \theta\right\}dt + \left\{\frac{u}{m}, p_u\right\}du \\ &= \left[\left\{g \cos \theta, \frac{p_\theta^2}{2mr^2}\right\} + \left\{\frac{p_\theta^2}{m^2r^3}, \frac{p_r^2}{2m} - mgr \cos \theta\right\}\right]dt + \frac{1}{m}du \\ &= \left(\frac{-g \sin \theta p_\theta}{mr^2} - \frac{3p_\theta^2 p_r}{m^3r^4} - \frac{-2g \sin \theta p_\theta}{mr^2}\right)dt + \frac{1}{m}du \\ &= -\left(\frac{3g \sin \theta p_\theta}{mr^2} + \frac{3p_\theta^2 p_r}{m^3r^4}\right)dt + \frac{1}{m}du. \end{aligned}$$

Como este último resultado provê uma relação entre as diferenciais dt e du , não há necessidade de adicionar mais vínculos, pois agora a condição para que H'_4 esteja em involução é que haja uma determinada relação entre du e dt . Devemos reescrever a equação de evolução contendo todos os vínculos que já foram adicionados.

$$dF = \{F, H'_0\}dt + \{F, H'_1\}du + \{F, H'_2\}d\beta + \{F, H'_3\}d\eta + \{F, H'_4\}d\gamma,$$

onde temos as relações:

$$\begin{aligned} H'_0 &= p_0 + H_0 \longrightarrow t \\ H'_1 &= p_u \longrightarrow u \\ H'_2 &= \psi \longrightarrow \beta \\ H'_3 &= \frac{p_r}{m} \longrightarrow \eta \\ H'_4 &= \frac{p_\theta^2}{m^2r^3} + g \cos \theta + \frac{u}{m} \longrightarrow \gamma \end{aligned}$$

Escrevamos a matriz M e verifiquemos a sua inversibilidade:

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{m} \\ 0 & 0 & \frac{1}{m} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{m} & 0 & \frac{3p_\theta^2}{m^3r^4} \\ \frac{1}{m} & 0 & -\frac{3p_\theta^2}{m^3r^4} & 0 \end{pmatrix}$$

Sua inversa é dada abaixo:

$$M^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{3p_\theta^2}{mr^4} & 0 & m \\ -\frac{3p_\theta^2}{mr^4} & 0 & -m & 0 \\ 0 & m & 0 & 0 \\ -m & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

O fato de M ser completamente inversível significa que todos os vínculos são não-involutivos e portanto devemos tratar a dinâmica do sistema usando os parênteses generalizados. Considerando (3.60) e (3.61), tendo em vista que já possuímos a matriz inversa, podemos escrever a equação de evolução em termos dos parênteses generalizados:

$$\begin{aligned} dF &= \{F, H'_0\}^* dt \\ &= [\{F, H'_0\} + \{F, H'_1\} \frac{3g \sin \theta p_\theta}{r^2} + \{F, H'_2\} (\frac{p_\theta^2}{mr^3} + mg \cos \theta + u + \frac{3p_\theta^2 \psi}{mr^4}) - \{F, H'_3\} p_r + \{F, H'_4\} m\psi] dt. \end{aligned}$$

Os vínculos H'_1, H'_2, H'_3 e H'_4 podem ser lidos, respectivamente, como

$$\begin{aligned} p_u &= 0, \\ \psi = r - l &= 0, \\ p_r &= 0, \\ \frac{p_\theta^2}{m^2 r^3} + g \cos \theta + \frac{u}{m} &= 0. \end{aligned}$$

O primeiro vínculo está relacionado à degenerescência de u . O segundo e o terceiro vínculos estão relacionados ao fato de o fio do pêndulo ser inextensível. O último vínculo nos dá uma expressão para o multiplicador de Lagrange:

$$u = -\frac{p_\theta^2}{mr^3} - mg \cos \theta.$$

Já que r é constante, resta obter apenas a equação de movimento relacionada à variável θ . Usando a equação de evolução, chegamos a

$$dp_\theta = [\{p_\theta, H'_0\} + \{p_\theta, H'_4\} m\psi] dt = (-mgr \sin \theta + mg\psi \sin \theta) dt.$$

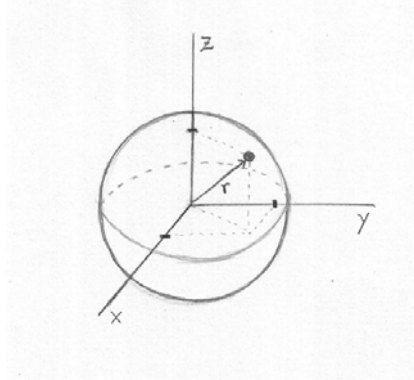
Como já temos que

$$\dot{\theta} = \frac{p_\theta}{mr^2} \Rightarrow \dot{p}_\theta = mr^2 \ddot{\theta},$$

e lembrando que devemos ter $\psi = r - l = 0$, usando as duas equações acima resulta no bem conhecido resultado

$$\ddot{\theta} = \frac{-g \sin \theta}{l}.$$

Partícula em uma esfera



Para este caso, a restrição entre as coordenadas de posição é dada por:

$$\psi = x^2 + y^2 + z^2 - r^2 = 0.$$

Usando um mutiplicador de Lagrange u para que possamos implementar a restrição ψ na lagrangiana do sistema, temos

$$L = \frac{m\dot{\mathbf{x}}^2}{2} + u\psi.$$

A hamiltoniana canônica é

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - u\psi.$$

Inicialmente, os vínculos são os seguintes:

$$\begin{aligned} H'_0 &= p_0 + H_0 = 0, \\ H'_1 &= p_u = 0. \end{aligned}$$

A equação de evolução de uma variável dinâmica desse sistema é:

$$dF = \{F, H'_0\}dt + \{F, H'_1\}du.$$

Para que o sistema seja integrável, os vínculos devem estar em involução. A fim de que isso seja alcançado, devemos respeitar as condições de integrabilidade:

$$\begin{aligned} dH'_0 &= 0, \\ dH'_1 &= 0. \end{aligned}$$

Vejamos:

$$dH'_0 = \{H'_0, H'_1\}du = \{-u\psi, p_u\}du = -\psi du.$$

Logo é necessário que mais um vínculo seja obedecido:

$$H'_2 = \psi = 0.$$

Vamos verificar se o novo vínculo satisfaz a condição de integrabilidade.

$$dH'_2 = \{H'_2, H'_0\}dt + \{H'_2, H'_1\}du = \{\psi, \frac{\mathbf{p}^2}{2m}\}dt = \frac{2\mathbf{x} \cdot \mathbf{p}}{m}dt.$$

Novo vínculo: $H'_3 = \frac{2\mathbf{x} \cdot \mathbf{p}}{m} = 0.$

$$dH'_3 = \{H'_3, H'_0\}dt + \{H'_3, H'_1\}du = \frac{2}{m^2}(\mathbf{p}^2 + 2mu\mathbf{x}^2)dt.$$

Mais um vínculo: $H'_4 = \frac{2}{m^2}(\mathbf{p}^2 + 2mu\mathbf{x}^2) = 0.$

$$dH'_4 = \{H'_4, H'_0\}dt + \{H'_4, H'_1\}du = \frac{16u\mathbf{x} \cdot \mathbf{p}}{m^2}dt + \frac{4\mathbf{x}^2}{m}du.$$

Como não temos mais vínculos a adicionar, vamos reescrever a equação de evolução das variáveis dinâmicas desse sistema:

$$dF = \{F, H'_0\}dt + \{F, H'_1\}du + \{F, H'_2\}d\theta + \{F, H'_3\}d\eta + \{F, H'_4\}d\gamma,$$

onde temos as relações:

$$\begin{aligned} H'_0 &= p_0 + H_0 \longrightarrow t \\ H'_1 &= p_u \longrightarrow u \\ H'_2 &= \psi \longrightarrow \beta \\ H'_3 &= \frac{2\mathbf{x} \cdot \mathbf{p}}{m} \longrightarrow \eta \\ H'_4 &= \frac{2}{m^2}(\mathbf{p}^2 + 2mu\mathbf{x}^2) \longrightarrow \gamma \end{aligned}$$

Agora é o momento em que devemos escrever a matriz M formada pelos parênteses de Poisson entre os vínculos H'_1, H'_2, H'_3, H'_4 e analisar sua inversibilidade, a fim de saber se os vínculos estão em involução.

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -\frac{4\mathbf{x}^2}{m} \\ 0 & 0 & \frac{4\mathbf{x}^2}{m} & \frac{8\mathbf{x} \cdot \mathbf{p}}{m^2} \\ 0 & -\frac{4\mathbf{x}^2}{m} & 0 & \frac{8}{m^3}(\mathbf{p}^2 - 2mu\mathbf{x}^2) \\ \frac{4\mathbf{x}^2}{m} & -\frac{8\mathbf{x} \cdot \mathbf{p}}{m^2} & -\frac{8}{m^3}(\mathbf{p}^2 - 2mu\mathbf{x}^2) & 0 \end{pmatrix}$$

Sua inversa é dada abaixo:

$$M^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & (\mathbf{p}^2 - 2mu\mathbf{x}^2)/2m\mathbf{x}^4 & -\mathbf{x} \cdot \mathbf{p}/2\mathbf{x}^4 & m/4\mathbf{x}^2 \\ -(\mathbf{p}^2 - 2mu\mathbf{x}^2)/2m\mathbf{x}^4 & 0 & -m/4\mathbf{x}^2 & 0 \\ \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}/2\mathbf{x}^4 & m/4\mathbf{x}^2 & 0 & 0 \\ -m/4\mathbf{x}^2 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

O fato de M ser completamente inversível significa que todos os vínculos são não-involutivos e portanto devemos tratar a dinâmica do sistema usando os parênteses generalizados. Como já possuímos a matriz inversa, podemos escrever a equação de evolução em termos dos parênteses generalizados como é mostrado em (3.60) e (3.61):

$$\begin{aligned} dF &= \{F, H'_0\}^* dt \\ &= [\{F, H'_0\} + \{F, H'_2\}](2 - \frac{r^2}{\mathbf{x}^2})\frac{\mathbf{p}^2}{2m\mathbf{x}^2} + \frac{ur^2}{\mathbf{x}^2}] - \{F, H'_3\}(2 - \frac{r^2}{\mathbf{x}^2})\frac{\mathbf{x} \cdot \mathbf{p}}{2\mathbf{x}^2} + \{F, H'_4\}\frac{m}{4}(1 - \frac{r^2}{\mathbf{x}^2})]dt. \end{aligned}$$

Os vínculos H'_1, H'_2, H'_3 e H'_4 podem ser lidos, respectivamente, como

$$\begin{aligned} p_u &= 0, \\ \psi = \mathbf{x}^2 - r^2 &= 0, \\ \mathbf{x} \cdot \mathbf{p} &= 0, \\ \mathbf{p}^2 + 2mu\mathbf{x}^2 &= 0. \end{aligned}$$

O primeiro dos vínculos está relacionado à degenerescência da coordenada u , o segundo é a equação da esfera. O terceiro vínculo é uma condição de perpendicularidade do vetor posição ao vetor velocidade, o que mantém a partícula sobre a superfície da esfera. O quarto vínculo nos fornece a expressão do multiplicador de Lagrange:

$$u = -\frac{\mathbf{p}^2}{2m\mathbf{x}^2}.$$

Tendo em vista que todos vínculos devem ser obedecidos, podemos chegar às seguintes equações de movimento:

$$\begin{aligned} d\mathbf{x} &= \frac{\mathbf{p}}{m}dt, \\ d\mathbf{p} &= -\frac{\mathbf{p}^2}{mr^2}\mathbf{x}dt, \\ \ddot{\mathbf{x}} &= \frac{\dot{\mathbf{p}}}{m} = -\frac{\mathbf{v}^2}{r^2}\mathbf{x} \cdot \mathbf{p}. \end{aligned}$$

Campo eletromagnético

Este é um exemplo de Teoria de Campos em que obteremos as equações de movimento de um campo eletromagnético livre usando o método que estudamos.

Como já nos é conhecido, a lagrangiana de um campo EM sem interações é dada por

$$L = \int \mathcal{L}(x) d^3x = -\frac{1}{4} \int F_{\alpha\beta}(x) F^{\alpha\beta}(x) d^3x,$$

$$F_{\alpha\beta}(x) = \partial_\alpha A_\beta(x) - \partial_\beta A_\alpha(x).$$

Temos que $\alpha, \beta = 0, 1, 2, 3$ e $x = (x^0, x^1, x^2, x^3)$ é um ponto do espaço-tempo. A função $\mathcal{L}$ é chamada de *densidade lagrangiana*. A razão de usarmos uma densidade agora é que, diferentemente dos exemplos anteriores, este não envolve a dinâmica de um objeto localizado em uma região específica, mas estamos tratando de um campo que preenche todo o espaço. As variáveis $A_\alpha(x)$ de campo passam a ocupar o papel que tinham as coordenadas generalizadas de posição q , de forma que as velocidades são

$$\dot{A}_\alpha = \frac{dA_\alpha}{dx^0} = \partial_0 A_\alpha.$$

A teoria de campos independe do parâmetro que se escolhe para analisar a evolução do sistema, mas a nossa escolha será $x^0 = ct$. Como consequência disso, os momentos conjugados às variáveis A_α são dados por

$$\pi^\alpha = \frac{\partial L}{\partial \dot{A}_\alpha} = \int \frac{\partial \mathcal{L}(y)}{\partial \partial_0 A_\alpha(x)} d^3y.$$

Para escrever a Hamiltoniana do campo precisamos obter os momentos conjugados:

$$\begin{aligned} \pi^0(x) &= \int \frac{\partial \mathcal{L}(y)}{\partial \partial_0 A_0(x)} dy^3 = -\frac{1}{2} \int \frac{\partial [\partial_\alpha A_\beta(y) - \partial_\beta A_\alpha(y)]}{\partial \partial_0 A_0(x)} F^{\alpha\beta}(y) d^3y \\ &= -\frac{1}{2} \int \frac{\partial [\partial_0 A_0(y) - \partial_0 A_0(y)]}{\partial \partial_0 A_0} F^{\alpha\beta}(y) d^3y = 0. \\ \pi^i(x) &= -\frac{1}{4} \int \frac{\partial (F_{\alpha\beta}(y) F^{\alpha\beta}(y))}{\partial \partial_0 A_i(x)} = - \int \left[\frac{\partial}{\partial \partial_0 A_i} (\partial_0 A_i(y) - \partial_i A_0(y)) F^{0i}(y) \right] d^3y \\ &= -\frac{1}{2} \int (F^{0i} - F^{i0}) \delta^3(x - y) d^3y = F^{i0}. \end{aligned}$$

A lagrangiana está escrita em termos das velocidades $\partial_0 A_\alpha$, e agora precisamos escrever a hamiltoniana em termos dos momentos π^α . Analisaremos a inversibilidade das velocidades nos momentos a partir da matriz hessiana, cujos elementos são dados por

$$W_{\alpha\beta} = \frac{\partial^2 L}{\partial \dot{A}_\alpha \partial \dot{A}_\beta} = \frac{\partial \pi^\alpha(x)}{\partial \dot{A}_\beta(y)}; \quad W_{0\alpha} = 0; \quad W_{ij} = -\delta_{ij} \delta^3(x - y).$$

$$W = -\delta^3(x - y) \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Isso mostra que o determinante possui uma parte singular que está relacionada ao vínculo:

$$\mathcal{H}'^1 = \pi^0 = 0.$$

Escrevamos a hamiltoniana:

$$H(A_\alpha, \pi^\alpha) = \int \dot{A}_\alpha \pi^\alpha d^3x - L = \int [(\partial_i A_0 - \eta_{ij} \pi^j) \pi^i + \frac{1}{4} F_{\alpha\beta} F^{\alpha\beta}] d^3x.$$

Como $F_{\alpha\beta} F^{\alpha\beta} = 2F_{0i} F^{0i} + F_{ij} F^{ij}$, temos

$$H(A_\alpha, \pi^\alpha) = \int [\partial_i A_0 \pi^i - \frac{1}{2} \eta_{ij} \pi^j \pi^i + \frac{1}{4} F_{ij} F^{ij}] d^3x = \int \mathcal{H} d^3x.$$

Temos inicialmente os vínculos

$$\begin{aligned} \mathcal{H}'^0 &= \partial_0 S + \mathcal{H} = 0, \\ \mathcal{H}'^1 &= \pi^0 = 0. \end{aligned}$$

Antes de escrevermos a equação de evolução, precisaremos redefinir os parênteses de Poisson:

$$\{F(x), G(y)\} = \frac{\partial F(x)}{\partial A_\alpha(z)} \frac{\partial G(y)}{\partial \pi^\alpha(z)} - \frac{\partial G(y)}{\partial A_\alpha(z)} \frac{\partial F(x)}{\partial \pi^\alpha(z)}.$$

Assim, a equação de evolução é

$$dF = \int [\{\mathcal{F}, \mathcal{H}'^0\} dx^0 + \{\mathcal{F}, \mathcal{H}'^1\} dA_0(y)] d^3y.$$

Impondo as condições de integrabilidade, temos

$$d\mathcal{H}'^1(x) = \int \{\pi^0(x), \mathcal{H}(y)\} dx^0 d^3y = \int -\frac{\partial \mathcal{H}(y)}{\partial A_0(x)} dx^0 d^3y.$$

Como

$$\frac{\partial \mathcal{H}(y)}{\partial A_0(x)} = \pi_i(y) \frac{\partial \partial_i A_0(y)}{\partial A_0(x)} = \pi^i(y) \frac{\partial}{\partial y^i} \delta^3(x - y),$$

e tendo em vista a propriedade da delta de Dirac

$$\int f(y) \frac{\partial}{\partial y} \delta^3(x - y) d^3y = - \int \frac{\partial}{\partial y} f(y) \delta^3(x - y) d^3y,$$

resulta

$$d\mathcal{H}'^1(x) = \frac{\partial \pi^i(x)}{\partial x^i} dx^0.$$

Então a condição de integrabilidade nos impõe um novo vínculo

$$\mathcal{H}'^2 = \partial_i \pi^i = 0.$$

$$\begin{aligned} d\mathcal{H}'^2(x) &= \int [\{\mathcal{H}'^2(x), \mathcal{H}'^0(y)\} dx^0 + \{\mathcal{H}'^2(x), \mathcal{H}'^1(y)\} dA_0(y)] d^3y \\ &= \int \{\partial_i \pi^i(x), \frac{1}{4} F_{jk}(y) F^{jk}(y)\} dx^0 d^3y = -\frac{1}{2} \int F^{jk}(y) \frac{\partial}{\partial x^i} [\frac{\partial}{\partial A_i(x)} (\frac{\partial A_k(y)}{\partial y^j} - \frac{\partial A_j(y)}{\partial y^k})] dx^0 d^3y \\ &= -\frac{1}{2} \int F^{jk}(y) \frac{\partial}{\partial x^i} [\frac{\partial}{\partial y^j} \delta_k^i - \frac{\partial}{\partial y^k} \delta_j^i] \delta^3(x-y) dx^0 d^3y = \frac{1}{2} [\frac{\partial}{\partial x^k} \frac{\partial}{\partial x^j}] F^{jk}(x) dx^0 = 0. \end{aligned}$$

Não é necessário adicionar mais vínculos, já que a expressão acima é identicamente nula. Os vínculos que temos são

$$\begin{aligned} \mathcal{H}'^0 &= \partial_0 S + \mathcal{H} = 0 \longrightarrow x^0 \\ \mathcal{H}'^1 &= \pi^0 = 0 \longrightarrow A_0 \\ \mathcal{H}'^2 &= \partial^i \pi_i = 0 \longrightarrow \omega \end{aligned}$$

A equação de evolução agora é reescrita como

$$dF = \int [\{\mathcal{F}, \mathcal{H}'^0\} dx^0 + \{\mathcal{F}, \mathcal{H}'^1\} dA_0(y) + \{\mathcal{F}, \mathcal{H}'^2\} d\omega(y)] d^3y.$$

É desnecessário testar a condição de integrabilidade com a nova equação de evolução, pois apenas um novo vínculo foi adicionado ao sistema.

Para vermos se os vínculos estão em involução, montaremos a matriz dos parênteses de Poisson dos vínculos:

$$M = \begin{pmatrix} \{\mathcal{H}'^1, \mathcal{H}'^1\} & \{\mathcal{H}'^1, \mathcal{H}'^2\} \\ \{\mathcal{H}'^2, \mathcal{H}'^1\} & \{\mathcal{H}'^2, \mathcal{H}'^2\} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Sendo o determinante da matriz acima nulo, implica que todos os vínculos do sistema estão em involução. Sendo assim, não podemos escrever a equação de evolução em termos dos parênteses generalizados já que ficamos impossibilitados de encontrar relações entre as diferenciais dx^0 , $dA_0(x)$ e $d\omega(x)$.

Obtenhamos agora as equações de movimento.

$$\begin{aligned} dA_i(x) &= \int [\{A^i(x), \partial_j A_0(y) \pi^j(y) - \frac{1}{2} \eta_{jk} \pi^j(y) \pi^k(y)\} dx^0 + \{A_i(x), \partial_j \pi^j(y)\} d\omega(y)] d^3y \\ &= \int [(\partial_j A_0(y) - \eta_{jk} \pi^k(y)) \delta_j^i \delta^3(x-y) dx^0 + \delta_j^i \frac{\partial}{\partial y^j} \delta^3(x-y) d\omega(y)] d^3y \\ &= (\partial_i A_0(x) - \eta_{ij} \pi^j(x)) dx^0 - \partial_i d\omega(x). \end{aligned}$$

Devemos salientar que como o A_0 foi escolhido como parâmetro independente, não faz sentido calcular sua equação de movimento. Lembrando também que $\pi^0 = 0$, as equações de movimento a serem obtidas para os momentos são

$$\begin{aligned} d\pi^i(x) &= \int \{\pi^i(x), \mathcal{H}^0(y)\} dx^0 d^3y = \int -\frac{\delta}{\delta A_i(x)} \left(\frac{1}{4} F_{jk}(y) F^{jk}(y) \right) dx^0 d^3y \\ &= -\frac{1}{2} \int \left(\frac{\partial}{\partial y^j} \delta_k^i - \frac{\partial}{\partial y^k} \delta_j^i \right) \delta^3(x-y) F_{jk}(y) dx^0 d^3y = -\frac{1}{2} \int [\partial_j F^{ji} - \partial_k F^{ik}] \delta^3(x-y) dx^0 d^3y \\ &= \partial_k F^{ki}(x) dx^0. \end{aligned}$$

Como esta expressão depende somente de dx^0 , podemos escrevê-la da seguinte forma:

$$\partial_0 \pi^i - \partial_j F^{ji} = 0 \longrightarrow \partial_\alpha F^{i\alpha} = 0.$$

Como o vínculo $\partial_i \pi^i$ deve ser obedecido, temos

$$\partial_\alpha F^{0\alpha} = 0.$$

As duas últimas equações podem ser unificadas em uma única expressão

$$\partial_\alpha F^{\alpha\beta} = 0,$$

que forma o primeiro par das equações de Maxwell para o campo eletromagnético sem fontes, que são

$$\begin{aligned} \nabla \times \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial x^0}, \\ \nabla \cdot \vec{B} &= 0. \end{aligned}$$

Verificamos, portanto, a aplicabilidade da teoria de vínculos de HJ em Mecânica e Teoria de Campos. Vimos como a condição de integrabilidade possibilitou lidar de forma natural com vínculos involutivos e não-involutivos, sendo que para estes últimos necessitou-se a introdução da álgebra dos parênteses generalizados para a descrição da dinâmica.

Capítulo 4

Modelo BF

O modelo BF (*background field*) é usado para estudar a gravitação quântica e considera a ação como sendo a integral do traço da forma $B \wedge F$, como veremos em detalhe na seção a seguir. A ação é assim tomada porque quando consideramos um elemento do grupo de Lie da teoria, devido às propriedades do traço e do produto exterior, o $\text{tr}(B \wedge F)$ é um invariante de calibre. O modelo BF é usado para os estudos da gravitação quântica.

Em teoria de campos, a ação é dada por

$$W = \int \mathcal{L} dx^4, \quad (4.1)$$

e o termo de Lie estudada no primeiro capítulo deve ser lido como

$$\Delta \mathcal{L} = E_a \bar{\delta} \phi^a + \partial_\mu G^\mu, \quad (4.2)$$

em que

$$E_a = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi^a} - \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\mu \phi^a}, \quad G^\mu = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\mu \phi^a} \bar{\delta} \phi^a + \mathcal{L} \delta x^\mu. \quad (4.3)$$

Podemos escrever a equação em termos do tensor energia-momento, cuja forma é

$$\Theta^\mu{}_\alpha = - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\mu \phi^a} \partial_\alpha \phi^a + \delta^\mu_\alpha \mathcal{L}. \quad (4.4)$$

Usando esta expressão, é verdade que

$$\delta^\mu_\alpha \mathcal{L} \delta x^\alpha = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\mu \phi^a} \partial_\alpha \phi^a \delta x^\alpha + \Theta^\mu{}_\alpha \delta x^\alpha. \quad (4.5)$$

Substituindo esse resultado na expressão de G^μ , encontramos

$$G^\mu = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\mu \phi^a} \delta \phi^a + \Theta^\mu{}_\alpha \delta x^\alpha. \quad (4.6)$$

Vamos agora escrever explicitamente o termo da equação de Lie que contém a equação de Euler-Lagrange:

$$E_a \bar{\delta} \phi^a = \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi^a} - \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\mu \phi^a} \right) (\delta \phi^a - \partial_\alpha \phi^a \delta x^\alpha) = E_a \delta \phi^a - \delta x^\alpha (\partial_\alpha \phi^a \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi^a} - \partial_\alpha \phi^a \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\mu \phi^a}). \quad (4.7)$$

Mas como

$$\partial_\alpha \phi^a \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi^a} = \delta_\alpha^\mu \partial_\alpha \mathcal{L} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\mu \phi^a} \partial_\alpha \partial_\mu \phi^a, \quad (4.8)$$

então temos que

$$E_a \bar{\delta} \phi^a = E_a \delta \phi^a - \partial_\mu \Theta^\mu_\alpha \delta x^\alpha. \quad (4.9)$$

Por fim, a equação de Lie pode ser reescrita como

$$E_a \delta \phi^a - \partial_\mu \Theta^\mu_\alpha \delta x^\alpha + \partial_\mu G^\mu = 0. \quad (4.10)$$

As equações (4.6) e (4.10) serão importantes para os cálculos que faremos no decorrer deste capítulo.

4.1 Modelo BF

Seja uma variedade M de d dimensões, um grupo de Lie G e uma $(d-2)$ -forma B , que é chamada de *campo de fundo*. Consideremos também uma 2-forma F obtida através da derivada covariante de uma conexão A que é 1-forma: $F = DA = dA + A \wedge A$.

A ação do modelo BF é dada por

$$W_{BF}[B, A] = \int_M \text{tr}(B \wedge F). \quad (4.11)$$

Pode ser mostrado que o modelo BF com $d = 2$ é equivalente ao modelo de Jackiw-Teitelboim [26] que, por sua vez, pode ser reformulado como uma teoria de calibre. Neste trabalho, consideraremos somente o caso bidimensional, ou seja, o campo de fundo B é uma 0-forma e o campo de conexão F é uma 2-forma. Eles podem ser escritos em termos dos geradores da álgebra de Lie $\mathcal{G}$:

$$F = \frac{1}{2} F_{\mu\nu}^a J_a dx^\mu \wedge dx^\nu, \quad (4.12)$$

$$B = B^a J_a. \quad (4.13)$$

E também o campo A escrito em termos dos geradores é dado por

$$A = A_\mu^a J_a dx^\mu. \quad (4.14)$$

Pela equivalência com o modelo de Jackiw-Teitelboim, temos que o índice $a = 0, 1, 2$ está relacionado a dois geradores de translações e um gerador de boost de Lorentz.

Escrevamos agora F em termos de A . Sabendo que

$$dA = \frac{1}{2}(\partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a)J_a dx^\mu \wedge dx^\nu, \quad (4.15)$$

$$A \wedge A = \frac{1}{2}(A_\mu A_\nu - A_\nu A_\mu)dx^\mu \wedge dx^\nu = \frac{1}{2}A_\mu^a A_\nu^b [J_a, J_b]dx^\mu \wedge dx^\nu, \quad (4.16)$$

temos

$$F = \frac{1}{2}\{(\partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a)J_a + A_\mu^a A_\nu^b [J_a, J_b]\}dx^\mu \wedge dx^\nu. \quad (4.17)$$

Uma vez que estamos nos restringindo à álgebra de Lie, temos $[J_a, J_b] = f_{ab}^c J_c$. Isso nos permite escrever separadamente

$$F_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + f_{bc}^a A_\mu^b A_\nu^c. \quad (4.18)$$

É conveniente que definamos neste momento a derivada covariante:

$$D_\mu A_\nu^a = \partial_\mu A_\nu^a - f_{bc}^a A_\mu^b A_\nu^c. \quad (4.19)$$

Agora que já obtemos a expressão para F , vamos nos voltar para a ação:

$$W_{BF} = \int tr(B \wedge F) = \frac{1}{2} \int B^a F_{\mu\nu}^b tr[J_a J_b] dx^\mu \wedge dx^\nu. \quad (4.20)$$

Tendo em vista que o traço de uma matriz é uma função linear e simétrica, consideraremos $g_{ab} = tr[J_a J_b]$ como as componentes de um tensor métrico e o usaremos para baixar o índice de B^a . Também levando em conta a antissimetria do produto exterior, teremos por fim

$$W_{BF} = \int F_{01}^a B_a dx^2. \quad (4.21)$$

Logo, a densidade lagrangiana é dada por

$$\mathcal{L} = F_{01}^a B_a. \quad (4.22)$$

A fim de obter as equações de movimento e analisar as simetrias desse formalismo, analisaremos a equação de Lie na forma dada por (4.10).

No caso do modelo BF bidimensional, temos dois campos independentes, isto é, B e A . Sendo assim, o termo de Lie terá a forma

$$\Delta\mathcal{L} = E_a^B \delta B_a + E_a^A \delta A_\nu^a - \partial_\mu \Theta^\mu_\alpha + \partial_\mu G^\mu. \quad (4.23)$$

Vamos obter separadamente as equações de Euler-Lagrange:

$$E_a^B = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial B_a} - \partial_\alpha \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\partial_\alpha B_a} = F_{01}^a. \quad (4.24)$$

$$E_a^A = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_\nu^a} - \partial_\alpha \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\alpha A_\nu^a} = f_{ab}^c (\delta_1^\nu A_0^b B_c - \delta_0^\nu A_1^b B_c) + \delta_0^\nu \partial_1 B_a - \delta_0^\nu \partial_0 B_a = \delta_0^\alpha D_1 B_a - \delta_1^\alpha D_0 B_a. \quad (4.25)$$

Então, as equações de movimento que obtivemos são:

$$F_{01}^a = 0, \quad (4.26)$$

$$\delta_0^\alpha D_1 B_a - \delta_1^\alpha D_0 B_a = 0. \quad (4.27)$$

A seguir obteremos as expressões para o tensor energia-momento e para o gerador. Tendo em vista que a densidade lagrangiana não tem dependência nas derivadas do campo B , o tensor energia-momento é dado por

$$\Theta^\mu{}_\alpha = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\mu A_\nu^a} \partial_\alpha A_\nu^a + \delta_\alpha^\mu \mathcal{L} = (\delta_1^\mu \partial_\alpha A_0^a - \delta_0^\mu \partial_\alpha A_1^a) B_a + \delta_\nu^\mu F_{01}^a B_a. \quad (4.28)$$

Usando a equação (4.6), temos

$$G^\mu = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\mu A_\nu^a} \delta A_\nu^a + \Theta^\mu{}_\alpha \delta x^\alpha = (\delta_0^\mu A_1^a - \delta_1^\mu A_0^a) B_a + \Theta^\mu{}_\alpha \delta x^\alpha. \quad (4.29)$$

Agora, considerando somente as variações a ponto fixo, $\delta x^\alpha = 0$, o termo de Lie se torna

$$\Delta \mathcal{L} = \delta B_a F_{01}^a + \delta A_0^a D_1 B_a - \delta A_1^a D_0 B_a + \partial_0 (B_a \delta A_1^a) - \partial_1 (B_a \delta A_0^a) = \delta B_a F_{01}^a + B_a (D_0 \delta A_1^a - D_1 \delta A_0^a). \quad (4.30)$$

Queremos descobrir qual tipo de transformação para o campo B torna o modelo BF invariante se considerarmos A_μ^a sendo um campo de calibre. Seja Λ^a uma função diferenciável arbitrária, então fazemos com que $\delta A_\mu^a = D_\mu \Lambda^a$. Com isso, a equação (4.30) se torna

$$\Delta \mathcal{L} = \delta B_a F_{01}^a + B_a [D_0, D_1] \Lambda^a. \quad (4.31)$$

Usando da definição (4.19) é possível chegar a seguinte regra de comutação:

$$[D_0, D_1] \Lambda^a = -f_{bc}{}^a \Lambda^b F_{01}^c. \quad (4.32)$$

Assim, temos

$$\Delta \mathcal{L} = (\delta B_a - f_{ca}{}^b B_b \Lambda^c) F_{01}^a. \quad (4.33)$$

Agora, impondo que a equação de Lie seja satisfeita, ou seja $\Delta \mathcal{L} = 0$, sobre o calibre $\delta A_\mu^a = D_\mu \Lambda^a$, obtemos uma restrição sobre o campo B :

$$\delta B_a = f_{ca}{}^b B_b \Lambda^c = -f_{ac}{}^b B_b \Lambda^c. \quad (4.34)$$

Logo, as transformações de calibre que deixam a teoria invariante são

$$\delta A_\mu^a = D_\mu \Lambda^a, \quad (4.35)$$

$$\delta B_a = -f_{ac}{}^b B_b \Lambda^c. \quad (4.36)$$

Devemos notar aqui a importância de termos escolhido o princípio de Weiss para estudar este modelo, pois a equação de Lie nos possibilitou obter as simetrias dos campos A e B .

4.2 Teoria de Hamilton-Jacobi no Modelo BF

A fim de analisar o modelo BF pela teoria de vínculos que desenvolvemos no capítulo 3, vamos reescrever a ação usando a definição (4.19):

$$W_{BF} = \int B_a (\partial_0 A_1^a + A_0^a D_1 B_a) dx^2. \quad (4.37)$$

Como podemos eliminar os termos de divergência na ação sem afetar as equações de movimento, podemos escrever

$$W_{BF} = \int (B_a \partial_0 A_1^a + A_0^a D_1 B_a) dx^2. \quad (4.38)$$

A ação escrita dessa forma é mais conveniente para uma análise de vínculos já que considera a componente A_0^a como um multiplicador de Lagrange. Queremos obter os vínculos canônicos da teoria. Começaremos obtendo as expressões para os momentos canônicos:

$$\pi_a^0 = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_0 A_0^a} = 0, \quad (4.39)$$

$$\pi_a^1 = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_0 A_1^a} = B_a, \quad (4.40)$$

$$\Pi^a = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_0 B_a} = 0. \quad (4.41)$$

Como o único momento não-nulo é o momento conjugado à componente A_1^a , e lembrando que agora temos $\mathcal{L} = B_a \partial_0 A_1^a + A_0^a D_1 B_a$, a hamiltoniana canônica é dada por

$$\mathcal{H}_0 = \pi_a^1 \partial_0 A_1^a - \mathcal{L} = -A_0^a D_1 B_a. \quad (4.42)$$

Definindo $\pi \equiv \partial_0 S$, o conjunto de EDP de HJ do modelo BF bidimensional é

$$\mathcal{H}' \equiv \pi + \mathcal{H}_0 = 0 \rightarrow x^0, \quad (4.43)$$

$$\mathcal{H}'^0_a \equiv \pi_a^0 = 0 \rightarrow A_0^a, \quad (4.44)$$

$$\mathcal{H}'^1_a \equiv \pi_a^1 - B_a = 0 \rightarrow A_1^a, \quad (4.45)$$

$$\mathcal{H}'^a \equiv \Pi^a = 0 \rightarrow B_a, \quad (4.46)$$

Esses são os vínculos iniciais da teoria. No lado direito estão relacionadas, para cada vínculo, as variáveis independentes que desempenham o papel de parâmetro, de forma análoga ao que foi visto no capítulo 3. Os parênteses de Poisson são definidos de forma tal que

$$\{A_\mu^a, \pi_b^\nu\} = \delta_b^a \delta_\mu^\nu \delta(x - y), \quad (4.47)$$

$$\{B_a, \Pi^b\} = \delta_b^a \delta(x - y). \quad (4.48)$$

A equação de evolução dinâmica do sistema é dada para o presente modelo por

$$dF = \int [\{\mathcal{F}, \mathcal{H}'\} dx^0 + \{\mathcal{F}, \mathcal{H}'^\mu_a\} dA_\mu^a + \{\mathcal{F}, \mathcal{H}'^a\} dB_a] dy. \quad (4.49)$$

4.2.1 Parênteses Generalizados

Quando testamos a involução dos vínculos para construirmos a matriz dos parênteses de Poisson, como fizemos na seção 3.3, notamos que $\mathcal{H}'^a$ e $\mathcal{H}'^1_a$ formam um subconjunto não-involutivo, pois $\{\mathcal{H}'^a, \mathcal{H}'^1_b\} = \delta_b^a \delta(x - y)$. Em razão disso, vamos definir $h^0 \equiv \mathcal{H}'^a$ e $h^1 \equiv \mathcal{H}'^1_a$; assim, a submatriz formada pelos parênteses de Poisson dos vínculos não-involutivos é

$$[M^{rs}] = \delta(x - y) \begin{pmatrix} 0_{3 \times 3} & 1_{3 \times 3} \\ -1_{3 \times 3} & 0_{3 \times 3} \end{pmatrix},$$

em que $r, s = 0, 1$. Sua inversa,

$$[M_{rs}^{-1}] = \delta(x - y) \begin{pmatrix} 0_{3 \times 3} & -1_{3 \times 3} \\ 1_{3 \times 3} & 0_{3 \times 3} \end{pmatrix},$$

será usada para construir os parênteses generalizados, reduzindo o espaço de fase com a eliminação dos parâmetros relacionados aos vínculos não-involutivos, ou seja, as componentes A_1^a e B_a . Logo, os parênteses generalizados do modelo BF terão a seguinte forma:

$$\{\mathcal{F}(x), \mathcal{G}(y)\}^* \equiv \{\mathcal{F}(x), \mathcal{G}(y)\} - \int \{\mathcal{F}(x), h'^s(z)\} M_{rs}^{-1}(z, w) \{h'^r(w), \mathcal{G}(y)\} dz dw. \quad (4.50)$$

Com esse resultado, a equação de evolução pode ser reescrita como

$$dF = \int [\{\mathcal{F}, \mathcal{H}'\}^* dx^0 + \{\mathcal{F}, \mathcal{H}'^0_a\}^* dA_0^a] dx. \quad (4.51)$$

É importante notar que com a redução do espaço de fase, B_a e Π^a não são mais variáveis canonicamente conjugadas, pois B_a passa a ser o momento canônico de A_1^a .

Testando a integrabilidade dos vínculos, encontramos que

$$dH_a'^0 = -D_1 B_a dx^0. \quad (4.52)$$

Sendo assim, a condição de integrabilidade impõe que um novo vínculo deve ser adicionado ao conjunto de EDP de HJ:

$$\mathcal{K}'_a = D_1 B_a = 0. \quad (4.53)$$

Quando testamos a integrabilidade deste novo vínculo, obtemos $d\mathcal{K}'_a = 0$. Portanto, além de $\mathcal{K}'_a$, não é necessário adicionar mais vínculos para que o conjunto de EDP de HJ seja integrável. Com isso, devemos fazer a correspondência do vínculo $\mathcal{K}'_a$ com um novo parâmetro ω^a e assim reescrever a equação de evolução:

$$dF = \int [\{\mathcal{F}, \mathcal{H}'\}^* dx^0 + \{\mathcal{F}, \mathcal{H}'_a\}^* dA_0^a + \{\mathcal{F}, \mathcal{K}'_a\}^* d\omega^a] dx. \quad (4.54)$$

4.2.2 Equações características

Usando a equação (4.54), podemos chegar as seguintes equações de movimento:

$$dA_\mu^a = \delta_\mu^1 D_1 A_0^a dx^0 + \delta_\mu^0 dA_0^a - \delta_\mu^1 D_1 d\omega^a, \quad (4.55)$$

$$d\pi_a^\mu = \delta_0^\mu D_1 B_a dx^0 - \delta_1^\mu f_{ab}^c B_c (A_0^b dx^0 - d\omega^b), \quad (4.56)$$

$$dB_a = -f_{ab}^c B_c (A_0^b dx^0 + d\omega^b), \quad (4.57)$$

$$d\Pi^a = 0. \quad (4.58)$$

Vamos analisar se essas equações são equivalentes às equações de movimento (4.26) e (4.27) já obtidas. Primeiramente, precisamos ter em mente a independência entre os parâmetros x^0 , A_0^a e ω^a , pois sendo assim, a evolução dinâmica do sistema se dá independentemente na direção de cada um deles. Então, analisando somente a evolução temporal, as equações de movimento se tornam

$$\partial_0 A_\mu^a = \delta_\mu^1 D_1 A_0^a, \quad (4.59)$$

$$\partial_0 \pi_a^\mu = \delta_0^\mu D_1 B_a - \delta_1^\mu f_{ab}^c B_c A_0^b, \quad (4.60)$$

$$D_0 B_a = 0, \quad (4.61)$$

$$\partial_0 \Pi^a = 0. \quad (4.62)$$

A componente $\mu = 0$ da equação (4.59) mostra que A_0^a permanece inalterada no tempo e a componente $\mu = 1$ reproduz a equação de Euler-Lagrange (4.26). Na equação (4.60), a componente $\mu = 0$ nos dá o vínculo (4.53) que é nulo como condição de integrabilidade. Já a componente $\mu = 1$, quando levamos em consideração a relação (4.40), provê a equação (4.61) que, por sua vez, é equivalente à equação de Euler-Lagrange (4.27). E a última equação (4.62) é só consequência do vínculo (4.46).

Portanto, mostramos que a teoria de vínculos de HJ aplicada ao modelo BF funciona perfeitamente, pois as equações características, quando analisadas pela evolução temporal, são equivalentes às equações de Euler-Lagrange.

Capítulo 5

Termodinâmica

A Termodinâmica se originou do advento das máquinas térmicas, sendo então uma ciência que se utiliza de termos mecânicos e térmicos [30]. Com o tempo alguns cientistas notaram que alguns conceitos termodinâmicos não eram apresentados de uma maneira consistente. Carathéodory foi um dos pioneiros, no início do século XX, do que chamamos de *Termodinâmica Axiomática*. Seu método, centrado nas expressões pffafianas, possibilitou uma formulação matemática rigorosa para a segunda lei da Termodinâmica. Apresentaremos neste capítulo o teorema de Carathéodory para expressões pffafianas usado para formular a entropia, sem nos aprofundarmos neste assunto, de forma que daremos mais atenção à teoria de HJ na termodinâmica usual.

Quando analisamos a primeira lei da Termodinâmica podemos perceber que há uma geometria de contato intrínseca. Veremos que é possível encontrar equações características para uma função geradora de transformações que mantenha inalterada a estrutura de contato. A partir daí, definiremos a equação de HJ para a Termodinâmica e validaremos com os exemplos do gás de Van der Waals e o ferromagneto de Curie-Weiss.

5.1 Conceitos da Termodinâmica

Inicialmente traremos à memória alguns conceitos básicos dessa importante área da física a fim de tornar fluente a compreensão deste capítulo.

Lei zero

Sejam A , B e C três sistemas. Se um equilíbrio térmico é estabelecido entre A e C e também entre B e C , então A e B estão em equilíbrio térmico entre si.

A lei zero está relacionada ao conceito de temperatura, de forma que se faz necessário definir uma função que expresse o equilíbrio térmico entre sistemas.

Primeira lei

A energia não pode ser criada ou destruída, apenas transformada em outras formas de

energia, sendo que sua transferência pode se dar em forma de calor ou trabalho.

A este enunciado se anexa a expressão que caracteriza a conservação da energia:

$$dE = \bar{d}Q + \bar{d}W. \quad (5.1)$$

Segunda lei

Existe uma propriedade inerente a cada sistema físico chamada entropia que sempre aumenta em processos irreversíveis e se mantém constante em processos reversíveis, contanto que se trate de um sistema isolado.

A segunda lei enuncia a entropia, que é uma função de estado extensiva, ou seja, que depende das dimensões físicas do sistema. A entropia de um sistema não isolado pode diminuir, pois desde que temos a fórmula

$$dS = \frac{dQ}{T}, \quad (5.2)$$

se retirarmos energia em forma de calor de um sistema, sua entropia diminuirá. No entanto, todo sistema não isolado será necessariamente parte de um sistema isolado maior e este, por sua vez, também terá sua entropia modificada, de forma que a variação da entropia no processo como um todo deverá ser sempre maior ou igual a zero. O maior sistema isolado que podemos conceber é o universo, portanto podemos enunciar a segunda lei da termodinâmica, outrossim, da seguinte maneira: *A entropia do universo só pode se manter constante ou aumentar, jamais diminuir.*

Terceira lei

A entropia de um sistema alcança um valor constante quando a temperatura vai tendendo a zero, e em um cristal perfeito a entropia é exatamente zero na temperatura de zero absoluto.

Essa lei é melhor entendida quando relembramos a fórmula de Boltzmann da mecânica estatística

$$S = k_B \log \Omega, \quad (5.3)$$

em que k_B é a constante de Boltzmann e Ω é o número de microestados do sistema. Quando um cristal perfeito está submetido à temperatura de zero absoluto, é possível apenas um microestado, levando a uma entropia nula.

Variáveis extensivas e intensivas

Variáveis extensivas são aquelas que dependem das dimensões físicas do sistema, no sentido que, caso se aumente a massa e o volume do sistema, as variáveis extensivas aumentarão na

mesma proporção. Variáveis como essas são a entropia, a energia interna e a entalpia, entre outras. Como ilustração, imaginemos um sistema físico qualquer que dobre de tamanho, ou seja, dobre de volume e massa, então também dobrarão de valor a energia, a entropia e as demais variáveis extensivas.

Variáveis intensivas são aquelas insensíveis às mudanças das proporções do sistema físico. Se dobrarmos um sistema qualquer de tamanho, teremos mantidos os valores de temperatura, pressão e viscosidade, que são exemplos de variáveis intensivas.

Funções de estado e Funções de caminho

Há dois tipos de funções que são fundamentais na termodinâmica. Um tipo são as funções de estado, que só dependem do estado presente do sistema, não importando o processo pelo qual ele passou para chegar a um determinado estado. Alguns exemplos de funções como essas são a energia interna, a entropia e a temperatura. O outro tipo são as funções de caminho, que se relacionam aos processos que o sistema sofreu para chegar a um tal estado. Funções desse tipo são o calor e o trabalho mecânico. Em suma, funções de estado são intrínsecas às características presentes do sistema, e funções de caminho são intrínsecas aos processos que acontecem no sistema.

5.2 Termodinâmica Axiomática

A formulação da Termodinâmica de Carathéodory parte dos axiomas abaixo.

Axioma I: A quantidade de calor introduzida em um objeto dentro de um recipiente diatérmico, que é definida por

$$Q = E_f - E_i - W, \quad (5.4)$$

é somente nula se se tratar de um processo adiabático.

Axioma II: Na vizinhança de qualquer estado A de um objeto há outros estados B que não podem ser alcançados a partir de A em processos adiabáticos reversíveis.

Comumente, as equações da Termodinâmica ocorrem em uma forma diferencial linear conhecida como *expressão de Pfaff*:

$$df = \sum X_i dx_i, \quad (5.5)$$

em que $i = 1, \dots, n$ e X_i são funções de algumas ou todas as variáveis independentes x_i .

A forma diferencial da primeira lei da Termodinâmica em um processo quasiestático é uma expressão pfaffiana:

$$\delta Q = dE - \delta W. \quad (5.6)$$

Na maioria dos casos, essa expressão não é integrável. No entanto, se as curvas definidas por

$$\vec{d}Q = dE - \vec{d}W = 0 \quad (5.7)$$

não levarem a todos os pontos da vizinhança de um ponto inicial no espaço dos x_i , então a equação pfaffiana (5.7) é integrável. Abaixo citaremos o teorema de Carathéodory para formas pfaffianas.

Teorema: Seja a equação pfaffiana

$$dx_0 + X_1 dx_1 + \dots + X_n dx_n = 0, \quad (5.8)$$

em que X_i são funções finitas, contínuas e diferenciáveis de x_i , e é sabido que em toda a vizinhança de um ponto arbitrário P no espaço dos x_i há pontos que não podem ser alcançados pelas curvas que satisfazem a essa equação, então deve haver um multiplicador da equação (5.8) que a torne uma diferencial exata.

Uma prova desse teorema pode ser encontrada em [31].

Uma função df é chamada de diferencial *exata* ou *total* se $\int df$ for independente do caminho. Analisemos um caso em que a expressão pfaffiana é da seguinte forma

$$df = Xdx + Ydy. \quad (5.9)$$

Para que df seja uma diferencial total, devem ser cumpridas as condições

$$X = \frac{\partial f}{\partial x}, \quad Y = \frac{\partial f}{\partial y}. \quad (5.10)$$

Como consequência disso, levando em conta que f é pelo menos duas vezes continuamente diferenciável, temos a chamada *relação de Schwarz*

$$\frac{\partial X}{\partial y} = \frac{\partial Y}{\partial x}, \quad (5.11)$$

isto é,

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} = \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}. \quad (5.12)$$

Consideraremos o calor $\vec{d}Q$, que é uma quantidade inexata e uma função de caminho, e o multiplicaremos por um fator integrante $\frac{1}{T}$ para construirmos a entropia dS que, por sua vez, é uma diferencial exata e uma função de estado do sistema:

$$dS = \frac{\vec{d}Q}{T} = \frac{dE - \vec{d}W}{T}. \quad (5.13)$$

Vimos assim que a teoria de expressões pffafianas foi usada para mostrar que a entropia é uma função construída pela multiplicação do calor por um fator integrante, a fim de obter uma função que possa caracterizar o estado de um sistema, de forma que ela é constante apenas em processos adiabáticos.

5.3 Teoria de Hamilton-Jacobi na Termodinâmica

Agora mostraremos uma maneira de aplicar a teoria de Hamilton-Jacobi nos problemas termodinâmicos. Começaremos analisando a dimensão ímpar do espaço de fase das variáveis termodinâmicas, que é uma consequência da primeira lei. Para o melhor entendimento deste fato, escolheremos o mais simples sistema termodinâmico possível, como segue.

Para um gás ideal com número fixo de partículas, temos cinco variáveis termodinâmicas U, S, T, P e V : energia interna, entropia, temperatura, pressão e volume. Pela primeira lei da termodinâmica, as variações infinitesimais dessas quantidades do sistema têm que obedecer a

$$dU - TdS + PdV = 0. \quad (5.14)$$

Essa equação implica na dimensionalidade ímpar do espaço de fase. As variáveis intensivas P e T aparecem em pares conjugados com as variáveis extensivas V e S , apresentando-se nas formas PdV e TdS . A energia interna é a única quantidade que não tem par conjugado. No entanto, a primeira lei também pode ser apresentada de outras formas, como por exemplo

$$dS - \frac{1}{T}dU - \frac{P}{T}dV = 0. \quad (5.15)$$

É verdade, assim, que qualquer uma das variáveis pode ocupar o posto de “variável fundamental” como o é a energia na equação (5.14), tendo como par conjugado a unidade. Isso vale tanto para as variáveis extensivas quanto para as intensivas, fazendo uso das transformações de Legendre, como mostram os exemplos abaixo.

Usando a entalpia H :

$$dH - VdP - TdS = 0 \Rightarrow dP - \frac{1}{V}dH + \frac{T}{V}dS = 0. \quad (5.16)$$

Ou então usando a energia livre de Helmholtz F :

$$dF + PdV + SdT = 0 \Rightarrow dT + \frac{1}{S}dF + \frac{P}{S}dV = 0. \quad (5.17)$$

Logo, vimos que o espaço de fase da termodinâmica tem sempre dimensão ímpar, mesmo que as variáveis termodinâmicas se apresentem sempre em pares conjugados, tal como entropia e temperatura, pressão e volume, campo magnético e magnetização, entre outros. Mais claramente, vimos que para um sistema com n graus termodinâmicos de liberdade, seu espaço de fase terá $2n + 1$ dimensões e este fato permitirá o uso de geometria de contato.

Geometria de contato

Seja um *patch* local com coordenadas $(q^0, q^1, \dots, q^n, p_1, \dots, p_n)$ de uma variedade com dimensão $2n + 1$. Uma *estrutura de contato* neste *patch* é uma 1-forma tal que

$$\alpha \sim dq^0 - p_i dq^i, \quad i = 1, \dots, n. \quad (5.18)$$

A uma 1-forma α pode ser multiplicada por uma função f não nula, e $f\alpha$ será uma 1-forma equivalente, já que a estrutura de contato é definida pela anulação das variações infinitesimais.

Existem várias outras coordenadas que mantêm a estrutura canônica de α inalterada. Tais transformações de coordenadas são as chamadas *transformações de contato*. Vejamos como procede uma transformação g , que implica em $(q^0, q^i, p_i) \rightarrow (Q^0, Q^i, P_i)$, sob tais exigências:

$$g(dq^0 - p_j dq^j) = dQ^0 - P_j dQ^j = \left[\frac{\partial Q^0}{\partial p_i} - P_j \frac{\partial Q^j}{\partial p_i} \right] dp_i + \left[\frac{\partial Q^0}{\partial q^i} - P_j \frac{\partial Q^j}{\partial q^i} \right] dq^i + \left(\frac{\partial Q^0}{\partial q^0} - P_i \frac{\partial Q^i}{\partial q^0} \right) dq^0. \quad (5.19)$$

Dessa equação inferimos as condições sobre a transformação:

$$g = \frac{\partial Q^0}{\partial q^0} - P_j \frac{\partial Q^j}{\partial q^0}, \quad (5.20)$$

$$\frac{\partial Q^0}{\partial p_i} = P_j \frac{\partial Q^j}{\partial p_i}, \quad (5.21)$$

$$\frac{\partial Q^0}{\partial q^i} - P_j \frac{\partial Q^j}{\partial q^i} = -p_i \left(\frac{\partial Q^0}{\partial q^0} - P_j \frac{\partial Q^j}{\partial q^0} \right). \quad (5.22)$$

Funções geradoras das transformações de contato

Analisaremos aqui o caso de transformações infinitesimais. Seja um parâmetro $\epsilon \ll 1$, então temos

$$Q^0 = q^0 + \epsilon X^0, \quad Q^i = q^i + \epsilon X^i, \quad P_i = p_i + \epsilon X_i, \quad (5.23)$$

onde definimos um campo vetorial

$$X_F = X^0 \frac{\partial}{\partial q^0} + X^i \frac{\partial}{\partial q^i} + X_i \frac{\partial}{\partial p_i}. \quad (5.24)$$

Quando substituirmos (5.23) em (5.20), (5.21) e (5.22), obtemos condições para as componentes vetoriais:

$$g = \frac{\partial X^0}{\partial q^0} - p_j \frac{\partial X^j}{\partial q^0}, \quad (5.25)$$

$$\frac{\partial X^0}{\partial p_i} = p_j \frac{\partial X^j}{\partial p_i}, \quad (5.26)$$

$$\frac{\partial X^0}{\partial q^i} - p_j \frac{\partial X^j}{\partial q^i} - X_i = -p_i \left(\frac{\partial X^0}{\partial q^0} - p_j \frac{\partial X^j}{\partial q^0} \right). \quad (5.27)$$

Trabalhando nessas relações, podemos ver que as componentes podem ser expressas em termos de uma única função $F = p_j X^j - X^0$:

$$X^0 = p_i \frac{\partial F}{\partial p_i} - F, \quad X^i = \frac{\partial F}{\partial p_i}, \quad X_i = -\left(\frac{\partial F}{\partial q^i} + p_i \frac{\partial F}{\partial q^0} \right). \quad (5.28)$$

Sendo assim, as transformações infinitesimais de contato são determinadas pela função F e por isso a chamamos de *função geradora*.

Podemos escrever o campo vetorial em termos de F :

$$X_F = \left(p_i \frac{\partial F}{\partial p_i} - F \right) \frac{\partial}{\partial q^0} + \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial}{\partial q^i} + \left(\frac{\partial F}{\partial q^i} + p_i \frac{\partial F}{\partial q^0} \right) \frac{\partial}{\partial p_i}. \quad (5.29)$$

A transformação infinitesimal da forma de contato α sob atuação deste campo vetorial pode ser facilmente calculada através da derivada de Lie

$$L_{X_F} \alpha = di_{X_F} \alpha + i_{X_F} d\alpha. \quad (5.30)$$

Para esse caso, temos

$$i_{X_F} = -F, \quad (5.31)$$

$$di_{X_F} = -\frac{\partial F}{\partial q^0} dq^0 - \frac{\partial F}{\partial q^i} dq^i - \frac{\partial F}{\partial p_i} dp_i, \quad (5.32)$$

$$d\alpha = -dp_i \wedge dq^i, \quad (5.33)$$

$$i_{X_F} d\alpha = \left(\frac{\partial F}{\partial q^i} + p_i \frac{\partial F}{\partial q^0} \right) dq^i + \frac{\partial F}{\partial p_i} dp_i. \quad (5.34)$$

Portanto,

$$L_{X_F} \alpha = -\frac{\partial F}{\partial q^0} \alpha. \quad (5.35)$$

Logo, o campo vetorial X_F modifica a 1-forma pela multiplicação de um escalar, mantendo a estrutura de contato.

5.3.1 Equações Características

Tomando o tempo como parâmetro da transformação, passamos a ter em (5.23) que $X^0 = \frac{dq^0}{dt}$, $X^i = \frac{dq^i}{dt}$ e $X_i = \frac{dp_i}{dt}$. Assim, uma função geradora define uma família de um parâmetro de transformações de contato, determinada pela solução das EDO abaixo

$$\frac{dq^0}{dt} = p_i \frac{\partial F}{\partial p_i} - F, \quad \frac{dq^i}{dt} = \frac{\partial F}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial F}{\partial q^i} - p_i \frac{\partial F}{\partial q^0}. \quad (5.36)$$

Estas são as *curvas características* da função geradora F . Comparando com o sistema de curvas características que Carathéodory construiu usando o método de Cauchy, verificamos a similaridade.

Veamos como a função F varia no tempo.

$$F = p_i X^i - X^0 = p_i \frac{dq^i}{dt} - \frac{dq^0}{dt} \quad (5.37)$$

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial q^i} \frac{dq^i}{dt} + \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{dp_i}{dt} + \frac{\partial F}{\partial q^0} \frac{dq^0}{dt} = \left(-\frac{dp_i}{dt} - p_i \frac{\partial F}{\partial q^0}\right) \frac{dq^i}{dt} + \frac{dq^i}{dt} \frac{dp_i}{dt} + \frac{\partial F}{\partial q^0} \frac{dq^0}{dt}, \quad (5.38)$$

em que usamos as relações provenientes de (5.36). Resta então que

$$\frac{dF}{dt} = -F \frac{\partial F}{\partial q^0}. \quad (5.39)$$

A expressão acima nos mostra que a única possibilidade de termos F constante é quando seu valor inicial é nulo. Olhando para (5.37) vemos que a função F é ela mesma uma estrutura de contato. Isto será importante para o que trataremos adiante.

5.4 Equação de Hamilton-Jacobi na Termodinâmica

Agora estamos prontos para formular a termodinâmica em termos de geometria de contato. Como vimos, o espaço de fase termodinâmico possui $2n + 1$ dimensões, então a primeira lei pode ser interpretada como uma estrutura de contato desse espaço

$$\alpha = dq^0 - p_i dq^i = 0. \quad (5.40)$$

Podemos dizer que as variáveis q são as variáveis extensivas enquanto que as variáveis p são as intensivas. Contudo, sabemos que podemos manipular essa proposição através das transformações de Legendre.

Se qualquer variação infinitesimal do estado de um sistema termodinâmico deve obedecer à primeira lei, então significa que as equações de estado de um sistema termodinâmico devem definir uma *subvariedade lagrangiana*. Esta, no espaço de fase, é uma variedade com dimensão igual a do espaço de configuração e na qual a 2-forma $dq \wedge dp$, que define uma estrutura simplética no espaço fase, é identicamente nula [32].

Se uma relação fundamental

$$q^0 = \Phi(q^1, \dots, q^n) \quad (5.41)$$

é conhecida, podemos obter as outras n equações de estado

$$p_i = \Phi_i(q^1, \dots, q^n), \quad \Phi_i = \frac{\partial \Phi}{\partial q^i}. \quad (5.42)$$

Consideremos o caso em que a função Φ dependa, além dos q^i , de n parâmetros $a_1, \dots, a_n$:

$$q^0 = \Phi(q^1, \dots, q^n, a_1, \dots, a_n), \quad (5.43)$$

implicando também

$$p_i = \Phi_i(q^1, \dots, q^n, a_1, \dots, a_n). \quad (5.44)$$

Vamos impor a condição de não-degenerescência

$$\det \frac{\partial^2 \Phi}{\partial q^i \partial a_j} \neq 0 \quad (5.45)$$

para que possamos eliminar os parâmetros $a_1, \dots, a_n$ das $n + 1$ equações de estado e escrever uma única relação entre as variáveis termodinâmicas:

$$f(q^0, q^1, \dots, q^n, p_1, \dots, p_n) = 0. \quad (5.46)$$

Mas essa equação é na verdade uma EDP de primeira ordem para a função Φ :

$$f(q^0, q^1, \dots, q^n, \frac{\partial \Phi}{\partial q^1}, \dots, \frac{\partial \Phi}{\partial q^n}) = 0 \quad (5.47)$$

Para descrever o estado de um sistema termodinâmico, a equação (5.47) deve ser equivalente à primeira lei, expressa por (5.40). Dotada das propriedades de estrutura de contato, podemos aproveitar os resultados que obtivemos para função geradora F na seção anterior e dizer que as equações características para a função f são dadas por

$$\frac{dq^0}{dt} = p_i \frac{\partial f}{\partial p_i} - f, \quad \frac{dq^i}{dt} = \frac{\partial f}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial f}{\partial q^i} - p_i \frac{\partial f}{\partial q^0}. \quad (5.48)$$

Reconhecemos assim que (5.47) é uma equação de Hamilton-Jacobi para a termodinâmica. A fim de ilustrar a teoria que apresentamos, encontraremos as equações de HJ para o *gás de van der Waals* e o *ferromagneto de Curie-Weiss*.

Gás de van der Waals

Como bem conhecemos, o gás de van der Waals é um modelo simples de gás não ideal:

$$P = \frac{T}{v - b} - \frac{a}{v^2}. \quad (5.49)$$

Temos que $v = \frac{V}{nR}$, sendo n o número de moles do gás e R a constante dos gases, e a e b são constantes determinadas empiricamente para um dado sistema físico, sendo a proporcional à força atrativa de curto alcance entre as moléculas e b o volume excluído devido ao tamanho finito das moléculas.

A entropia molar desse sistema é dada por

$$s = \log[(v - b)(u + \frac{a}{v})^{\frac{3}{2}}], \quad (5.50)$$

em que

$$s = \frac{S}{nR} \quad u = \frac{U}{nR}. \quad (5.51)$$

Vejamos a relação abaixo:

$$\frac{1}{T} = (\frac{\partial s}{\partial u})_v = \frac{3}{2} \frac{1}{u + \frac{a}{v}} \quad (5.52)$$

Resolvendo (5.52) para a , obtemos

$$a = v(\frac{3T}{2} - u) \quad (5.53)$$

Usando o resultado acima em (5.49) e resolvendo para b , obtemos

$$b = v - \frac{T}{P + \frac{1}{v}(\frac{3T}{2} - u)}. \quad (5.54)$$

Quando substituimos (5.53) e (5.54) em (5.51), resulta

$$[\frac{P}{T}v - \frac{1}{T}u + \frac{3}{2}]^2 T^{-3} = \frac{27}{8} v^2 \exp^{-2s}. \quad (5.55)$$

Esta é uma equação que relaciona as cinco variáveis termodinâmicas, representando uma hipersuperfície no espaço de fase. Usando as relações

$$\frac{1}{T} = (\frac{\partial s}{\partial u})_v, \quad \frac{P}{T} = (\frac{\partial s}{\partial v})_u, \quad (5.56)$$

essa equação pode ser reescrita como

$$[v(\frac{\partial s}{\partial v}) - u(\frac{\partial s}{\partial u}) + \frac{3}{2}]^2 (\frac{\partial s}{\partial u})^3 = \frac{27}{8} v^2 \exp^{-2s}. \quad (5.57)$$

Essa é uma equação diferencial parcial para s que chamamos de equação de Hamilton-Jacobi para os gases de Van der Waals.

Ferromagneto de Curie-Weiss

Alguns materiais interagem com um campo magnético externo, pois em sua constituição há dipolos magnéticos que tendem a se alinhar com o campo. Podemos classificar esses materiais em três tipos: *diamagnetos*, *paramagnetos* e *ferromagnetos*. Quando o campo magnético é aplicado, os dipolos magnéticos dos *diamagnetos* se alinham opostamente ao campo, enquanto que os dipolos dos *paramagnetos* se alinham paralelamente. Os *ferromagnetos* têm as propriedades do paramagnetismo, no entanto, quando o campo magnético é "desligado", os ferromagnetos se mantêm magnetizados. Existe uma temperatura, para cada material, acima da qual um ferromagneto passa a ser um paramagneto devido ao movimento térmico aleatório que exerce resistência ao alinhamento dos dipolos. Trata-se da *temperatura de Curie*.

A primeira lei da termodinâmica para sistemas magnéticos é

$$dU - TdS - BdM = 0, \quad (5.58)$$

em que M é a magnetização do material devido ao campo magnético B . Podemos escrever a equação acima também da seguinte forma:

$$ds = \frac{1}{T}du - bdm, \quad (5.59)$$

sendo que $b = \frac{B}{T}$ e $m = \frac{M}{nR}$.

Cada material possui uma equação de estado que relaciona b com m . À medida que aumentamos o campo b , a magnetização m tende a um valor limite m_0 , situação essa em que todos os dipolos magnéticos ficam alinhados. Para um paramagneto, temos um modelo simples que descreve essa relação:

$$m = m_0 g(bm_0), \quad (5.60)$$

em que g é uma função característica do material. Uma alternativa para descrever essa relação no caso de um ferromagneto nos é provida pelo *modelo de Curie-Weiss*:

$$m = m_0 g\left(m_0 b + \frac{T_c}{T} \frac{m}{m_0}\right), \quad (5.61)$$

em que T_c é a temperatura de Curie. Se h é a função inversa de g , então

$$b = \frac{1}{m_0} h\left(\frac{m}{m_0}\right) - \frac{T_c}{T} \frac{m}{m_0^2}. \quad (5.62)$$

Devemos notar que essa equação impõe que $b = b(m, T)$. Então, para que a equação (5.59) seja uma diferencial exata, precisamos que

$$u(m, T) = -\frac{1}{2} T_c \left(\frac{m}{m_0}\right)^2 + u_0(T). \quad (5.63)$$

Quando substituimos (5.62) e (5.63) em (5.59), definindo $x = \frac{m}{m_0}$, obtemos

$$ds = -h(x)dx + \frac{1}{T}du_0. \quad (5.64)$$

Com isso, a entropia pode ser escrita como

$$s = s_1(x) + s_0(T), \quad (5.65)$$

e identificamos

$$u_0(T) = \int_0^{s_0(T)} T' ds_0(T'), \quad s_1(x) = - \int_0^x h(x') dx'. \quad (5.66)$$

Podemos eliminar os parâmetros m_0 e T_c para obter uma relação entre as variáveis s, T, b, u e m . Tomemos a equação (5.62):

$$mb = xh(x) - x^2 \frac{T_c}{T}. \quad (5.67)$$

Da equação (5.63), segue que

$$T_c = - \frac{2(u - u_0)}{x^2}, \quad (5.68)$$

e, portanto,

$$mb = xh(x) + \frac{2(u - u_0)}{T}. \quad (5.69)$$

Definiremos agora duas funções:

$$k(s_1) = x, \quad j(y) = k(y)h(k(y)). \quad (5.70)$$

Então, $x = k(s - s_0)$, levando à relação que queremos:

$$mb = j(s - s_0) + \frac{2(u - u_0)}{T}. \quad (5.71)$$

Para continuar, tomaremos o caso de momentos magnéticos com spin $\frac{1}{2}$, onde temos que

$$g(y) = \frac{y}{\sqrt{1+y^2}}, \quad h(x) = \frac{x}{\sqrt{1-x^2}}, \quad s_1(x) = \sqrt{1-x^2} - 1. \quad (5.72)$$

E para as relações de (5.70), teremos

$$k(y) = \sqrt{1 - (y - 1)^2}, \quad j(y) = \frac{1}{y} - y. \quad (5.73)$$

Para a parte não-magnética da energia interna, consideraremos um simples modelo: o material é como se fosse constituído por uma rede na qual seus vértices são "habitados" pelas moléculas, que por sua vez efetuam movimento oscilatório. Neste caso, a equipartição de energia nos dá

$$u_0(T) = \frac{\mu}{2}T, \quad (5.74)$$

e como consequência

$$s_0(T) = \frac{\mu}{2} \log T, \quad (5.75)$$

sendo que μ expressa o número de graus de liberdade. Com essas considerações, a equação (5.71) se torna

$$mb = \frac{1}{s - s_0} - [s - s_0] + 2 \frac{(u - u_0)}{T} = \frac{1}{s - \frac{\mu}{2} \log T} - s + \frac{\mu}{2} \log T + 2 \frac{u}{T} - \mu. \quad (5.76)$$

Usaremos a energia livre de Helmholtz para tomar T e m como as variáveis termodinâmicas. Sendo que $f = \frac{F}{nR}$, sabemos que

$$f = u - Ts, \quad (5.77)$$

$$df = -sdT + Tb dm, \quad s = -\left(\frac{\partial f}{\partial T}\right)_m, \quad b = \frac{1}{T} \left(\frac{\partial f}{\partial m}\right)_T. \quad (5.78)$$

Levando isso a (5.76), obtemos a equação de Hamilton-Jacobi para o ferromagneto de Curie-Weiss:

$$\left(\frac{\mu}{2} \log T + \frac{2f}{T} - \mu - \frac{\partial f}{\partial T} - \frac{m}{T} \frac{\partial f}{\partial m}\right) \left(\frac{\partial f}{\partial T} + \frac{\mu}{2} \log T\right) = 1. \quad (5.79)$$

Por fim, vimos que podemos descrever o estado de um sistema termodinâmico através de uma equação de HJ. Não iremos prolongar este capítulo com a resolução das equações de HJ para o gás de van der Waals e o ferromagneto de Curie-Weiss. No entanto, pode ser visto em [29] que quando se resolve as equações características desses sistemas, vê-se que o parâmetro t que chamamos de *tempo* é uma quantidade proporcional à entropia. Continuamos trabalhando para uma melhor compreensão deste fato, assim como estamos analisando a estrutura simplética da Termodinâmica para verificar as semelhanças com a Mecânica Clássica, o que pode contribuir para uma possível extensão da teoria de vínculos de HJ nos sistemas termodinâmicos.

Conclusão e Perspectivas

Neste trabalho apresentamos uma teoria de vínculos de HJ, aplicando-a em problemas de Mecânica Clássica e Teoria de Campos. Para construir essa teoria, tomamos como base o trabalho de Carathéodory para a teoria de HJ, que é uma formulação lagrangiana. Mostramos no segundo capítulo que para chegar à equação de HJ foi usado o método das lagrangianas equivalentes, o qual consiste em construir uma nova lagrangiana, a partir da lagrangiana conhecida, que seja identicamente nula, tornando o problema de minimizar a ação trivial. A nova lagrangiana difere da lagrangiana original por uma derivada total temporal da função $S(q, t)$ que tem valores fixos nos extremos da trajetória e por isso se pôde verificar que as duas lagrangianas representam problemas variacionais equivalentes. Vimos que o método das características provê um conjunto de equações diferenciais ordinárias - as equações características - que solucionam uma equação diferencial parcial de primeira ordem. Quando esta é a equação de HJ, as equações características são as equações de movimento de um sistema físico.

No capítulo 3, estudamos sistemas em que a condição hessiana não é obedecida, ou seja, nem todas as velocidades são inversíveis e, portanto, se trata de problemas com vínculos. A não inversibilidade das velocidades leva, de antemão, a um problema quando se quer construir a função hamiltoniana, que só depende das coordenadas e dos momentos. No entanto, mostramos que, quando os vínculos são obedecidos, a hamiltoniana passa a não depender das velocidades não inversíveis. Assim, vimos que a equação de HJ juntamente com as equações dos vínculos do sistema formam um conjunto de EDP de HJ e, quando analisamos sua integrabilidade através da condição de Frobenius, vimos que foi necessário introduzir uma nova álgebra quando os vínculos não estão em involução: a álgebra dos parênteses generalizados. Verificamos que a imposição de que todos os vínculos obedeçam à condição de integrabilidade faz necessário que se adicione vínculos que, de início, não estavam sendo considerados. Para ilustrar como funciona a teoria, resolvemos dois exemplos de vínculos não involutivos - pêndulo simples e partícula na esfera - e um exemplo de vínculos involutivos - o campo eletromagnético livre. Neste último exemplo, mostramos que os parâmetros relacionados aos vínculos involutivos não possuem relação entre si e, portanto, se faz desnecessário o uso dos parênteses generalizados para a descrição da dinâmica do sistema.

No capítulo 4, mostramos como a teoria de vínculos de HJ se aplica ao modelo BF bidimensional. Vimos que as equações de movimento que obtivemos eram compatíveis com as obtidas pela equação de Euler-Lagrange. Além disso, usamos a equação de Lie provida pelo princípio de Weiss para investigar as simetrias do sistema. O modelo BF é ainda nosso objeto de estudo para futuros trabalhos dentro da teoria de vínculos de HJ e temos em perspectiva analisar este modelo para mais dimensões, assim como usando supersimetria com e sem matéria. Em paralelo, analisaremos a ligação existente entre o princípio de Weiss e o teorema de Noether para estudar a aplicabilidade da teoria de vínculos de HJ nas teorias de calibre.

Por fim, no capítulo 5 discutimos sobre a Termodinâmica Axiomática de Carathéodory, em

que vimos como ele utilizou a teoria de expressões pffafianas para formular a segunda lei da Termodinâmica. Depois analisamos a estrutura de contato intrínseca à primeira lei e encontramos as equações características como condições que devem ser obedecidas pelas transformações infinitesimais que deixam a estrutura de contato inalterada e, em seguida, apresentamos a equação de HJ como uma equação equivalente à primeira lei. A teoria de HJ na Termodinâmica é um objeto recente de estudo e, por conseguinte, estamos analisando se é possível estender a teoria de vínculos que apresentamos no capítulo 3 para os sistemas termodinâmicos.

Referências Bibliográficas

- [1] I. C. Moreira, *Maupertuis (1698-1759) e o Princípio da Mínima Ação*, Revista Brasileira de Ensino de Física **21**, 1 (1999).
- [2] C. Lanczos, *The Variational Principles of Mechanics*. 4ª edio. Toronto: Dover Publications (1986).
- [3] P. Weiss, *On the Hamilton-Jacobi Theory and Quantization of a Dynamical Continuum*, Proc. R. Soc. Lond. **A169**, 102 (1938).
- [4] C. Carathéodory, *Calculus of Variations and Partial Differential Equations of the First Order*. 3ª edição. Providence: American Mathematical Society (1999).
- [5] Y. Güler, *Il Nuovo Cimento* **B100**, 251 (1987); *On the dynamics of singular, continuous systems*, J. Math. Phys. **30**, 785 (1992); *Il Nuovo Cimento* **B107**, 1398 (1992).
- [6] D. Baleanu, Y. Güler, *Hamilton-Jacobi treatment of a nonrelativistic particle on a curved space*, J. Phys. **A34**, 73 (2001).
- [7] D. Baleanu, Y. Güler, *Multi - Hamilton-Jacobi quantization of $O(3)$ nonlinear sigma model*, Mod. Phys. Lett. **A16**, 873 (2001).
- [8] D. Baleanu, Y. Güler, *Hamilton-Jacobi treatment of chiral Schwinger model*, Int. J. Theor. Phys. **40**, 2017 (2001); *Hamilton-Jacobi treatment of front form Schwinger model*, Int. J. Mod. Phys. **A17**, 1449 (2002).
- [9] S. T. Hong, Y. W. Kim, K. D. Rothe, *Symplectic Embedding and Hamilton-Jacobi analysis of Proca Model*, Mod. Phys. Lett. **A17**, 435 (2002);
D. Baleanu, Y. Güler, *Hamilton-Jacobi formalism of Abelian Proca's model revisited*, *Il Nuovo Cimento*. **B117**, 353 (2002).
- [10] D. Baleanu, Y. Güler, *2-D gravity and the Hamilton-Jacobi formalism*, *Il Nuovo Cimento* **B117**, 917 (2002).
- [11] B. M. Pimentel, P.J. Pompeia, J.F. da Rocha-Neto, R.G. Teixeira, *The Teleparallel Lagrangian and Hamilton-Jacobi formalism*, Gen. Rel. Grav. **35**, 877 (2003);

- B. M. Pimentel, P. J. Pompeia, J. F. da Rocha-Neto, *The Hamilton-Jacobi approach to teleparallelism*, Il Nuovo Cimento **B120**, 981 (2005).
- [12] M. C. Bertin, B. M. Pimentel, P. J. Pompeia, *First order actions: A New view*, Mod. Phys. Lett. **A20**, 2873 (2005).
- [13] M. C. Bertin, B. M. Pimentel, P. J. Pompeia, *Hamilton-Jacobi approach for first order actions and theories with higher derivatives*, Ann. Phys. **323**, 527 (2008).
- [14] M. C. Bertin, B. M. Pimentel, C. E. Valcárcel, *Non-Involutive Constrained Systems and Hamilton-Jacobi Formalism*, Ann. Phys. **323**, 3137 (2008).
- [15] M. C. Bertin, B. M. Pimentel, C. E. Valcárcel, G. R. Zambrano, *Hamilton-Jacobi formalism on the null-plane: Applications*, PoS ISFTG 046 (2009).
- [16] M. C. Bertin, B. M. Pimentel, C. E. Valcárcel, G. R. Zambrano, *Topologically Massive Yang-Mills field on the null-plane: A Hamilton-Jacobi approach*, AIP Conf. Proc. **1296**, 402 (2010).
- [17] M. C. Bertin, B. M. Pimentel, P. J. Pompeia, *General Relativity in two dimensions: A Hamilton-Jacobi constraint analysis*, Ann. Phys. **325**, 2499 (2010).
- [18] M. C. Bertin, B. M. Pimentel, C. E. Valcárcel, *Hamilton-Jacobi formalism for Linearized Gravity*, Class. Quant. Grav. **28**, 175015 (2011).
- [19] B. M. Pimentel, C. E. Valcárcel, *Correspondence between the Self-Dual model and the Topologically Massive Electrodynamics: A new view*, Presented in XII Hadron Physics (2012).
- [20] B. M. Pimentel, R. G. Teixeira, *Hamilton-Jacobi formulation for singular systems with second order Lagrangians*, Il Nuovo Cimento **B111**, p.841-854 (1996).
- [21] B. M. Pimentel, R. G. Teixeira, *Generalization of the Hamilton-Jacobi approach for higher order singular systems*, Il Nuovo Cimento **B113**, p.805-820 (1998).
- [22] B. M. Pimentel, R. G. Teixeira, J. L. Tomazelli, *Hamilton-Jacobi approach to Berezinian singular systems*, Ann. Phys. **267**, 75 (1998).
- [23] P. A. M. Dirac, *Generalized Hamiltonian dynamics*, Can. J. Math. **2**, 129 (1950); *The Hamiltonian form of field dynamics*, Can. J. Math. **3**, 1 (1951); *Lectures on Quantum Mechanics* (Yeshiva University, New York 1964).
- [24] P. G. Bergmann, *Non-linear field theories*, Phys. Rev. **75**, 680 (1949);
J. L. Anderson, P. G. Bergmann, *Constraints in Covariant Field Theories*, Phys. Rev. **83**, 1018 (1951);

- P. G. Bergmann, I. Goldberg, *Dirac Bracket Transformations in Phase Space*, Phys. Rev. **98**, 531 (1955).
- [25] M. C. Bertin, B. M. Pimentel, C. E. Valcárcel, *Two dimensional BF gravity: A Hamilton-Jacobi analysis*, aceito em 2012 no J. Math. Phys.
- [26] R. Jackiw, *Two Lectures on two-dimensional gravity*, arXiv:9511048[gr-qc] (1995); D. Grumiller, W. Kummer, D. V. Vassilevich, *Dilaton gravity in two-dimensions*, Phys. Rept. **369**, 327 (2002).
- [27] O. Redlich, *Fundamental Thermodynamics Since Carathéodory*, Rev. of Modern Physics, **40**, 3 (1968).
- [28] L. Pogliani, M. N. Berberan-Santos, *Constantin Carathéodory and the axiomatic thermodynamics*, J. of Math. Chemistry **28**, 1-3 (2000).
- [29] S. G. Rajeev, *A Hamilton-Jacobi Formalism for Thermodynamics*, Annals of Physics, **323**, 9 (2008).
- [30] H. B. Callen, *Thermodynamics*, Singapura: John Wiley & Sons (1985).
- [31] B. Bernstein, *Proof of Carathéodory's Local Theorem and Its Global Application to Thermostatics*, J. Math. Phys. **1**, 222 (1960).
- [32] V. I. Arnold, *Mathematical Methods of Classical Mechanics*, Harrisonburg: Springer-Verlag (1974).