



Instituto de Física Teórica
Universidade Estadual Paulista

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

IFT-D.009/11

Caos e Termalização na Teoria de Yang-Mills com Quebra Espontânea de Simetria

Marcio Woitek Junior

Orientador

Prof. Dr. Gastão Inácio Krein

Setembro de 2011

Agradecimentos

Ao Prof. Gastão Krein, pela confiança na minha capacidade de trabalho.

Aos meus pais, por terem criado as condições necessárias para eu realizar um trabalho como este.

À CAPES, pelo suporte financeiro.

Resumo

Uma das características mais importantes das teorias de *gauge* não-Abelianas é a não-linearidade das equações de campo clássicas. Mostra-se no contexto da teoria de Yang-Mills que essa característica pode fazer com que o campo de *gauge* apresente comportamento caótico. Isso pode acontecer mesmo quando estivermos considerando a dinâmica do campo na ausência de fontes, isto é, o vácuo da teoria de Yang-Mills. Discutimos a relação entre os comportamentos caótico e ergódico. Em seguida, introduzimos a formulação de Berdichevsky da Mecânica Estatística Clássica para sistemas dinâmicos Hamiltonianos que são ergódicos e possuem poucos graus de liberdade. A Mecânica Estatística de Berdichevsky é usada para estudar a situação mais simples numa teoria de *gauge* não-Abeliana onde as variáveis de campo são caóticas e o espaço de fase correspondente tem a propriedade geométrica necessária. Mostramos que, para os propósitos desse estudo, um par de campos escalares complexos deve ser incluído no problema. Mais precisamente, analisamos o modelo de Higgs não-Abeliano; a Lagrangiana da teoria considerada possui uma simetria $SU(2)$. A transição de uma descrição dinâmica do sistema de Yang-Mills-Higgs (fora do equilíbrio termodinâmico) para uma descrição termodinâmica (quando ele atingiu o equilíbrio) é investigada numericamente. Mostra-se que depois de um tempo suficientemente longo as soluções numéricas se comportam de tal maneira que o sistema pode ser descrito de um jeito mais simples através de grandezas como a temperatura, calculadas de acordo com as prescrições da Mecânica Estatística de equilíbrio. Estas são previstas analiticamente para comparação com os resultados numéricos. Verifica-se que há concordância entre as previsões analíticas e as numéricas, de modo que a termalização do sistema de Yang-Mills-Higgs pode ser explicada com o auxílio da Mecânica Estatística de Berdichevsky. Uma abordagem dinâmica ao estudo da termalização em teorias de *gauge* não-Abelianas — como a utilizada neste trabalho — pode se mostrar útil, por exemplo, na análise da termalização do Plasma de Quarks e Glúons.

Palavras-chave: Caos, Temperatura, Quebra Espontânea de Simetria.

Áreas do conhecimento: Dinâmica Não-linear, Mecânica Estatística, Teoria de *Gauge*.

Abstract

One of the most important features of non-Abelian gauge theories is the non-linearity of the classical field equations. In the context of Yang-Mills theory it is shown that this feature can cause the gauge field to show chaotic behavior. That can happen even when we are considering the field dynamics in the absence of sources, i.e., the vacuum of the Yang-Mills theory. We discuss the connection between chaotic and ergodic behaviors. Then we introduce Berdichevsky's formulation of Classical Statistical Mechanics for Hamiltonian dynamical systems that are both ergodic and low-dimensional. Berdichevsky's theory of Statistical Mechanics is used to study the simplest situation in a non-Abelian gauge theory where the field variables are chaotic and the corresponding phase space has the necessary geometric property. We show that, for the purposes of this study, a pair of complex scalar fields must be introduced in the problem. More precisely, we analyse the so-called non-Abelian Higgs model; the Lagrangian of the theory we are considering has a $SU(2)$ symmetry. The transition from a non-equilibrium dynamical description of the Yang-Mills-Higgs system to a thermodynamical description when it reaches equilibrium is numerically investigated. It is shown that after a sufficiently long time the numerical solutions behave in such a manner that the system can be described by quantities like the temperature, determined in accordance with the prescriptions of equilibrium Statistical Mechanics. These are predicted analytically for comparison with the numerical results. It is verified that there is agreement between analytical and numerical predictions so that the thermalization of the Yang-Mills-Higgs system can be explained with the aid of Berdichevsky's Statistical Mechanics. A dynamical approach to the study of thermalization in non-Abelian gauge theories — like the one we try in this work — can prove itself useful, for instance, for the analysis of the Quark-Gluon Plasma's thermalization.

Sumário

1	Introdução	1
2	Métodos Numéricos	7
2.1	Introdução	7
2.2	Integradores Simpléticos	8
2.2.1	Construção do Algoritmo	8
2.2.2	Mapeamentos Simpléticos	19
2.3	Caos no Sentido de Lyapunov	25
2.4	Seção de Poincaré	30
3	Mecânica Estatística de Berdichevsky	33
3.1	Caos e Ergodicidade	33
3.2	Formulação de Berdichevsky da Mecânica Estatística	36
3.3	Exemplo: Oscilador Quártico	43
3.4	Termalização em Teorias de <i>Gauge</i>	46
4	Caos em Teorias Clássicas de <i>Gauge</i>	47
4.1	Lei de Conservação do <i>Isospin</i>	47
4.2	Teorias de <i>Gauge</i>	49
4.2.1	Eletrodinâmica	49
4.2.2	Teorias de <i>Gauge</i> Não-Abelianas	55
4.3	Caos em Teorias de <i>Gauge</i> Não-Abelianas	64
4.4	Modelos de Termalização	74
5	Termalização Caótica na Teoria de Yang-Mills-Higgs	77
5.1	Quebra Espontânea de Simetria	77
5.2	Teoria de Yang-Mills-Higgs	78
5.3	Mecânica Clássica de Yang-Mills-Higgs	84
5.4	Resultados	87
6	Conclusão e Perspectivas Futuras	99

Capítulo 1

Introdução

Mecânica Estatística

É um dos princípios da teoria de Boltzmann da Mecânica Estatística Clássica (MEC) que as propriedades dinâmicas e as termodinâmicas de um sistema físico estão conectadas e podem ser descritas no contexto de uma mesma teoria. Boltzmann buscava uma descrição para sistemas termodinâmicos típicos, como um gás. Analisando um sistema desse tipo no contexto da formulação Hamiltoniana da Mecânica Clássica, podemos descrevê-lo num espaço de fase $6N$ -dimensional, cujas direções independentes estão relacionadas aos $3N$ pares de variáveis canonicamente conjugadas (q_j, p_j) ($j = 1, \dots, 3N$) associados às N partículas que integram o sistema¹. Além disso, esses sistemas são constituídos por um número muito grande de partículas, da ordem de magnitude do número de Avogadro.

Como o número de graus de liberdade é consideravelmente grande, Boltzmann postulou que a dinâmica de um sistema desse tipo deveria ser *ergódica*. Para explicar o conceito de ergodicidade, consideraremos o exemplo de um gás clássico. Nesse caso, dizer que a dinâmica é ergódica significa que as colisões entre os constituintes do gás ocorrem, por hipótese, com tanta frequência que, se esperarmos por um intervalo de tempo suficientemente longo, cada partícula receberá todo tipo de transferência de *momentum* e visitará cada ponto acessível do espaço de configuração. Portanto, se considerarmos a evolução do sistema por um tempo grande o bastante para que ele atinja o equilíbrio termodinâmico — isto é, para que ele deixe de passar por mudanças macroscopicamente observáveis —, o sistema de N partículas vai visitar todos os pontos fisicamente acessíveis do espaço de fase, cobrindo essa região uniformemente. Desse modo, no equilíbrio, as médias temporais de variáveis dinâmicas

¹Note que cada partícula precisa de 3 coordenadas generalizadas para ser localizada no espaço de configuração tridimensional.

refletem o comportamento médio do sistema no espaço de fase. Essa hipótese, a chamada *hipótese ergódica*, é um dos pilares conceituais da MEC.

Apesar da MEC ser uma teoria construída para descrever sistemas com muitos graus de liberdade, o que nos permite introduzir uma hipótese ergódica, alguém poderia se perguntar: o que é fundamental para o sucesso da MEC? Muitos graus de liberdade ou uma dinâmica ergódica? Essa pergunta foi considerada pela primeira vez por Berdichevsky [1].

Ele argumentou que a ergodicidade é o elemento que garante a validade das leis da MEC e considerou a possibilidade de construir uma formulação dessa teoria para sistemas com poucos graus de liberdade, mas cuja dinâmica é ergódica. Ele concluiu que, se o sistema for ergódico nas superfícies de energia — definidas pela condição $H = E$, onde H é a Hamiltoniana do sistema e $E \geq 0$ é uma constante — e se estas encerrarem regiões do espaço de fase com volume finito, é possível estender a MEC a sistemas ergódicos com poucos graus de liberdade. Note que essa construção exige que a função de Hamilton seja uma constante de movimento. Em outras palavras, portanto, além de ergódico, o sistema também deve ser autônomo.

Como o próprio Berdichevsky discute, essa “nova formulação” da MEC já era conhecida por Gibbs e Hertz [1]. Sendo assim, vale a pena notar que as fórmulas usadas por Berdichevsky para estender a MEC são tais que a formulação usual para sistemas com muitos graus de liberdade é recuperada naturalmente quando o número de graus de liberdade N tende a infinito [2, 3]. Isso significa que as expressões consideradas por Berdichevsky e aquelas tradicionalmente usadas para construir a formulação usual da MEC [4] fornecem os mesmos resultados no limite de infinitos graus de liberdade.

Curiosamente, por haver essa liberdade para escolher uma formulação dentre várias possíveis, aquela que se aplica apenas a sistemas com muitos graus de liberdade ganhou preferência. Então, se adotarmos a visão de que a ergodicidade é o elemento que garante a validade das leis da MEC, podemos exigir que a teoria seja aplicável a sistemas ergódicos com um número arbitrário² de graus de liberdade. Isso nos permite escolher apenas uma das várias formulações possíveis da MEC, removendo uma das arbitrariedades existentes na formulação dessa teoria, como discutido em [5]. Certas grandezas, como a entropia, ainda continuam definidas a menos de uma

constante aditiva, mas a dependência delas nas quantidades geométricas associadas ao espaço de fase é bem determinada.

Plasma de Quarks e Glúons

Atualmente, acredita-se que as interações fortes são descritas pela teoria conhecida como *Cromodinâmica Quântica* (QCD, do inglês “*Quantum Chromodynamics*”) [6]. Essa é uma teoria de *gauge* não-Abeliana cujo grupo de simetria é $SU(3)$. Por simplicidade, fazemos como é comum na literatura (como, por exemplo, na Ref. [7]) e buscamos entender alguns dos fenômenos característicos da QCD através do estudo da teoria de Yang-Mills (YM), que tem $SU(2)$ como grupo de *gauge*³. Dessa maneira, evitamos uma dificuldade técnica associada à maior complexidade da estrutura de grupo de $SU(3)$ em comparação com a de $SU(2)$ sem, por outro lado, remover certas características da QCD que têm origem na exigência de invariância de *gauge*. Um exemplo de uma tal característica é a não-linearidade das equações de campo clássicas, que pode induzir um comportamento caótico por parte das variáveis de campo envolvidas no problema.

No contexto da QCD, uma possível nova fase da matéria tem sido objeto de grande interesse, tanto teórico quanto experimental. Trata-se do chamado *Plasma de Quarks e Glúons* (QGP, do inglês “*Quark-Gluon Plasma*”) [8]. Esse é um sistema físico que deve ter existido no princípio do Universo e que, espera-se, pode ser produzido experimentalmente através de colisões (ultra-)relativísticas de íons pesados. Núcleos atômicos são acelerados até que os valores das suas energias cinéticas sejam muito maiores do que os das suas energias de repouso e a colisão entre eles é provocada. A energia associada ao processo de colisão é tão alta que espera-se observar a chamada *fase de desconfinamento* da QCD. Sob condições extremas, como aquelas existentes em colisões de íons pesados, quarks e glúons podem se manifestar como objetos livres (no sentido de que os quarks, que interagem por intermédio dos glúons, não estão confinados, formando hádrons), o sistema do qual eles fazem parte apresentando quasi-neutralidade de cor⁴ e comportamento coletivo, ou seja, formando um plasma [9]. Uma questão importante para a compreensão desse sistema está relacionada

²Arbitrário desde que maior ou igual a 2. Como discutiremos no Capítulo 3, a exigência de ergodicidade exclui os sistemas com apenas 1 grau de liberdade.

³É comum ver a denominação “teoria de YM” sendo usada para indicar uma teoria de *gauge* não-Abeliana com grupo de simetria $SU(N)$, onde N é um inteiro tal que $N \geq 2$. De acordo com essa terminologia, a QCD é um exemplo de teoria de YM. No entanto, esclarecemos que, no contexto do presente trabalho, “teoria de YM” é como chamaremos a teoria de *gauge* cujo grupo de simetria é o $SU(2)$.

com a redistribuição da energia que é usada para produzi-lo (correspondendo, essencialmente, à energia cinética dos íons pesados envolvidos na colisão necessária para essa produção).

Basicamente, é importante saber como o QGP, que, quando produzido, estará fora do equilíbrio termodinâmico, chega a este. Em particular, atenção tem sido dada ao tempo característico que esse sistema leva para atingir o equilíbrio termodinâmico. O conhecimento da escala de tempo de equilíbrio é importante, uma vez que ela não apenas fornece uma informação a respeito da confiabilidade da hipótese de equilíbrio termodinâmico local feita em muitas abordagens dinâmicas (como, por exemplo, a hidrodinâmica), como ela também entra formalmente nos cálculos de coeficientes de transporte.

Termalização em Teorias de Gauge

O presente trabalho tem como objetivo estudar, utilizando uma abordagem dinâmica, como sistemas caóticos em teorias clássicas de *gauge* alcançam o equilíbrio termodinâmico. Começamos analisando um sistema de campos de *gauge* SU(2) numa situação em que há quebra espontânea da simetria de *gauge*. Por conta desse fato, o bóson de *gauge* da teoria, isto é, o *quantum* do campo de *gauge* adquire uma certa massa de repouso não-nula [10].

Esclarecemos que esse não é bem o caso existente na QCD. Nessa teoria, a invariância sob transformações de *gauge* SU(3) locais da Lagrangiana livre dos glúons está associada à simetria de cor, que é exata, não sendo, portanto, quebrada. Justificamos o estudo do problema onde a simetria de *gauge* é espontaneamente quebrada dizendo que esse caso representa uma situação suficientemente mais simples tal que a proposta de uma abordagem dinâmica pode ser testada.

O modelo que consideramos é um sistema dinâmico Hamiltoniano (SDH) com apenas 2 graus de liberdade. No entanto, apesar da dimensionalidade relativamente baixa do espaço de fase, a dinâmica do campo de *gauge* com quebra espontânea de simetria é rica o bastante e tem as boas propriedades necessárias para permitir uma análise estatística. Apesar da diferença conceitual entre o problema que nós consideramos e o análogo na QCD, a dinâmica do sistema de campos de *gauge* SU(2)

⁴Cor é a “carga” não-Abeliana da QCD e desempenha no contexto das interações fortes um papel análogo àquele desempenhado pela carga elétrica na Eletrodinâmica.

também possui a característica da não-linearidade existente na QCD, associada à auto-interação do campo dos glúons.

O nosso estudo está baseado na formulação da MEC para sistemas dinâmicos Hamiltonianos (SDHs) autônomos e ergódicos proposta por Berdichevsky [1]. Uma abordagem baseada nessa formulação tem a vantagem de nos permitir calcular temperaturas dinamicamente, ou seja, à medida que as equações clássicas de movimento são resolvidas numericamente, de maneira que sabemos que o sistema não está mais fora do equilíbrio termodinâmico quando os resultados numéricos para essas temperaturas assumem os valores previstos teoricamente para essas grandezas no equilíbrio termodinâmico. O problema de mostrar como um dado sistema físico alcança o equilíbrio termodinâmico é o que chamaremos de problema da *termalização*; por razões que ficarão evidentes mais adiante, quando um processo de termalização puder ser explicado no contexto da MEC de sistemas com poucos graus de liberdade, usaremos dizer que houve *termalização caótica*. Enfatizamos que possivelmente a termalização do QGP pode ser entendida como uma termalização caótica, no sentido de que uma abordagem numérica como a que acabamos de descrever pode ser utilizada com sucesso.

Organização e Convenções

Esta dissertação está organizada da maneira que descreveremos. No Capítulo 2, os métodos numéricos que serão empregados neste trabalho são introduzidos. A formulação de Berdichevsky da MEC é apresentada no Capítulo 3. O Capítulo 4 é dedicado a uma discussão sobre as teorias de *gauge* e o comportamento caótico no contexto destas. O assunto que justifica a escolha do título deste trabalho — ou seja, a termalização caótica no modelo de Higgs não-Abeliano — é discutido no Capítulo 5. É aqui que os nossos resultados são apresentados. As considerações finais são feitas no Capítulo 6.

Neste trabalho, adotaremos o sistema natural de unidades, ou seja, tomaremos a velocidade da luz c , a constante de Planck reduzida $\hbar$ e a constante de Boltzmann k_B iguais a 1: $c = \hbar = k_B = 1$. Também utilizamos uma convenção de soma sobre índices repetidos. Fazemos isso mesmo quando ambos estão sobrescritos, por exemplo; o posicionamento dos índices deve, no entanto, sempre ser observado. A menos que mencionemos o contrário, os índices de “cor” (letras latinas do início do alfabeto: $a, b, c, \dots$) variam entre 1 e 3 e os índices de Lorentz (letras gregas: $\mu, \nu, \lambda, \dots$)

variam entre 0 e 3. Para manipular objetos matemáticos com índices de Lorentz (tensores do espaço-tempo de Minkowski), adotamos a seguinte convenção para as componentes covariantes do tensor métrico de acordo com uma base Cartesiana: $g_{\mu\nu} = \text{diag}(+1, -1, -1, -1)$.

Capítulo 2

Métodos Numéricos

2.1 Introdução

O estudo da MEC de acordo com as prescrições de Berdichevsky envolve a análise da evolução de sistemas físicos descritos por sistemas não-lineares de equações diferenciais ordinárias. Como, em geral, equações diferenciais não-lineares não podem ser resolvidas por meio de métodos analíticos, temos a necessidade de utilizar métodos numéricos para obter as suas soluções e estudar as informações que estas fornecem. Sendo assim, o objetivo do presente capítulo é introduzir os métodos numéricos empregados neste trabalho.

Na Seção 2.2, apresentamos o método simplético de integração de SDHs, usado neste contexto sempre que precisarmos estudar numericamente a evolução dos nossos sistemas físicos de interesse¹. Em seguida, introduzimos os dois métodos numéricos cujos resultados fornecem a justificativa para analisarmos um dado SDH com poucos graus de liberdade à luz da MEC de Berdichevsky. O primeiro deles, discutido na Seção 2.3, é a determinação numérica do Expoente Máximo de Lyapunov. A aplicação desse método vai nos permitir dizer se a evolução dos sistemas físicos considerados pode ser caótica. E, finalmente, na Seção 2.4, é discutida a técnica da seção de Poincaré. Como veremos, a aplicação desta vai nos fornecer uma informação a respeito da ergodicidade de um dado SDH.

¹Exceto, como discutiremos mais adiante, quando esse estudo é feito com o propósito de determinar o Expoente Máximo de Lyapunov.

2.2 Integradores Simpléticos

2.2.1 Construção do Algoritmo

O objetivo da presente seção é introduzir um método numérico bastante eficiente para a integração numérica de sistemas de equações diferenciais que podem ser derivados de uma Hamiltoniana. Sendo assim, considere o SDH com s graus de liberdade (s inteiro, $s \geq 1$). A Hamiltoniana H é, portanto, uma função de s coordenadas generalizadas $q_1, \dots, q_s$ e dos seus respectivos *momenta* canonicamente conjugados $p_1, \dots, p_s$, onde estes são dados em termos da função Lagrangiana L do sistema por [11]

$$p_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \quad (2.1)$$

onde $j = 1, \dots, s$ e

$$\dot{q}_j \equiv \frac{dq_j}{dt} \quad (2.2)$$

denota a j -ésima componente da velocidade generalizada se t denotar o parâmetro de evolução do sistema. A evolução das variáveis canônicas é determinada pelas equações de Hamilton:

$$\dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j} \quad (2.3a)$$

$$\dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j} \quad (2.3b)$$

onde, mais uma vez, o ponto denota diferenciação em relação a t e $j = 1, \dots, s$.

Suporemos, por simplicidade, que H não depende explicitamente de t , o que, em termos físicos, significa supor que o sistema é conservativo. Essa simplificação é justificada pelo fato de que todos os SDHs considerados nos nossos estudos da MEC podem ser descritos no *ensemble* microcanônico, tendo a Hamiltoniana como uma constante de movimento. Denotamos, dessa maneira, a dependência de H nas coordenadas $\mathbf{q} = (q_1, \dots, q_s)$ e nos *momenta* $\mathbf{p} = (p_1, \dots, p_s)$ por $H = H(\mathbf{q}, \mathbf{p})^2$.

Para obter um esquema que vai nos permitir integrar numericamente um SDH, primeiro obtemos uma solução formal das equações de Hamilton, Eq. (2.3). Com esse

²Note-se, porém, que também é possível obter um método simplético de integração para sistemas dinâmicos cuja Hamiltoniana depende explicitamente de t através de um termo de energia potencial [12]. Estender a construção que faremos para contemplar tais sistemas não representa uma dificuldade e, sim, uma generalização desnecessária no contexto do presente trabalho.

objetivo, começamos reescrevendo as equações de movimento. Introduza o *parênteses de Poisson* de duas variáveis dinâmicas $A = A(\mathbf{q}, \mathbf{p}; t)$ e $B = B(\mathbf{q}, \mathbf{p}; t)$ através de

$$\{A, B\} \equiv \frac{\partial A}{\partial q_j} \frac{\partial B}{\partial p_j} - \frac{\partial A}{\partial p_j} \frac{\partial B}{\partial q_j} \quad (2.4)$$

onde há uma soma implícita sobre o índice repetido j e este varia no mesmo intervalo considerado nos parágrafos acima. Em termos do parênteses de Poisson, a equação que determina a evolução da função A é dada por

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\} + \frac{\partial A}{\partial t} \quad (2.5)$$

onde as equações de movimento (2.3) foram usadas para derivar a fórmula acima. Em particular, a Eq. (2.5) fornece para as variáveis canônicas o seguinte resultado:

$$\dot{q}_j = \{q_j, H\} \quad (2.6a)$$

$$\dot{p}_j = \{p_j, H\} \quad (2.6b)$$

Em termos da m -ésima componente do vetor $\mathbf{z} = (q_1, \dots, q_s, p_1, \dots, p_s)$, as equações de Hamilton se escrevem como

$$\dot{z}_m = \{z_m, H\} \quad (2.7)$$

onde $m = 1, \dots, 2s$. Formalmente, portanto:

$$\dot{\mathbf{z}} = \{\mathbf{z}, H\} \quad (2.8)$$

A questão agora é: como integrar o sistema de equações acima? Com o intuito de responder essa pergunta, fazemos uma breve digressão. Sabe-se que o problema de determinar a função $y = y(x)$ que satisfaz a equação diferencial

$$\frac{dy}{dx} = \alpha y \quad (2.9)$$

onde α é um parâmetro real que independe de x , com a condição $y(x = x_0) = y_0$ tem a sua solução dada por

$$y(x) = \exp[\alpha(x - x_0)]y_0 \quad (2.10)$$

O procedimento formal para integrar a Eq. (2.8) está baseado numa analogia com o caso acima. Defina antes o operador diferencial D_G através da relação

$$D_GF = \{F, G\} \quad (2.11)$$

onde F e G são duas variáveis dinâmicas bem comportadas arbitrárias. D_G é considerado um operador diferencial, pois possui a propriedade linear

$$D_G(\lambda_1 F_1 + \lambda_2 F_2) = \lambda_1 D_GF_1 + \lambda_2 D_GF_2 \quad (2.12)$$

onde λ_k são constantes reais arbitrárias e F_k são duas variáveis dinâmicas quaisquer ($k = 1, 2$). Além disso, vale uma regra de Leibniz para D_G :

$$D_G(F_1 F_2) = (D_GF_1)F_2 + F_1 D_GF_2 \quad (2.13)$$

As duas últimas propriedades estabelecem D_G como um operador diferencial. Outra propriedade desse operador que será importante para a construção do algoritmo simplético é a seguinte:

$$D_{F_1+F_2} = D_{F_1} + D_{F_2} \quad (2.14)$$

Retornando agora à integração formal das equações de Hamilton na forma da Eq. (2.8), note que esta se escreve em termos de D_H da seguinte forma:

$$\dot{\mathbf{z}} = D_H \mathbf{z} \quad (2.15)$$

Por analogia com o caso mais simples da Eq. (2.9), escrevemos prontamente a solução formal da Eq. (2.15) quando a evolução do respectivo SDH é considerada desde $t = 0$ até $t = \tau$:

$$\mathbf{z}(\tau) = \exp(\tau D_H) \mathbf{z}(0) \quad (2.16)$$

Aqui é conveniente revisitar o que nós entendemos por uma solução das equações de Hamilton. Normalmente, pensamos numa solução como uma curva integral, ou seja, vemos a prescrição $\mathbf{z} = \mathbf{z}(t)$ como dando uma curva no espaço de fase parametrizada por t . Se a solução $\mathbf{z}(t)$ for contínua, visualizamos, portanto, a evolução do respectivo sistema dinâmico desde $t = t_0$ até $t = t_1$ como o tracejar de uma linha contínua ligando os estados físicos inicial $\mathbf{z}(t = t_0)$ e final $\mathbf{z}(t = t_1)$. Usaremos, no entanto, a expressão formal (2.16) para propor uma nova interpretação das soluções como mapeamentos que mandam o estado físico $\mathbf{z}(0)$ do sistema em $t = 0$ no estado $\mathbf{z}(\tau)$ em $t = \tau$. Analisando a Eq. (2.16), é possível interpretar um tal mapeamento

como sendo implementado através da atuação do operador $\exp(\tau D_H)$. Enfatizamos que, fisicamente, a atuação deste é equivalente a considerar a evolução de um sistema que pode ser obtido da Hamiltoniana H desde $t = t_0$ até $t = t_0 + \tau$. Essas observações irão se mostrar fundamentais para a construção do algoritmo simplético de integração.

Procedemos com a nossa discussão utilizando a expressão formal (2.16) para desenvolver o esquema numérico desejado. De um ponto de vista computacional, estudar a dinâmica do sistema da Eq. (2.15) desde $t = t_0$ até $t = t_N$ exige a discretização do intervalo $t_0 \leq t \leq t_N$. Isso significa que este é dividido em N subintervalos de mesmo comprimento

$$h = \frac{t_N - t_0}{N} \quad (2.17)$$

(N inteiro, $N \gg 1$). Consideramos então os valores de t dados por $t = t_n$, onde $t_n = t_0 + nh$ ($n = 0, \dots, N$). Uma maneira de integrar numericamente a Eq. (2.15) é através da construção de um mapeamento que leva o estado do sistema físico de $\mathbf{z}(t_0)$ em $\mathbf{z}(t_1)$, de $\mathbf{z}(t_1)$ em $\mathbf{z}(t_2)$ e assim por diante até o sistema chegar ao estado $\mathbf{z}(t_N)$. Levando em consideração o fato de que $t_{n+1} - t_n = h$ ($n = 0, \dots, N - 1$) e a discussão feita no parágrafo anterior sobre a interpretação da Eq. (2.16), chegamos à conclusão de que o mapeamento que buscamos é dado por $\exp(hD_H)$.

Antes de dar seguimento, fazemos uma simplificação. Mais precisamente, iremos nos limitar à consideração de SDHs cuja função Hamiltoniana tem a forma

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = T(\mathbf{p}) + V(\mathbf{q}) \quad (2.18)$$

onde T representa a energia cinética do sistema e V denota a energia potencial. Restringir a discussão ao caso de Hamiltonianas com a forma da Eq. (2.18) pode parecer uma simplificação arbitrária neste ponto, mas todos os SDHs considerados no presente trabalho têm essa forma particular. Para tais sistemas, o operador $\exp(hD_H)$ se escreve

$$\exp(hD_H) = \exp(hD_{T+V}) = \exp[h(D_T + D_V)] \quad (2.19)$$

onde utilizamos a propriedade (2.14). A última expressão é bastante útil, pois vai nos permitir escrever de maneira aproximada o mapeamento $\exp(hD_H)$ como uma composição de mapeamentos. Estes são da forma $\exp(d_j h D_V)$ ou da forma

$\exp(c_j h D_T)$, onde c_j e d_j são constantes reais e $j = 1, \dots, k$. O número inteiro $k \geq 1$ é o que chamaremos de número de estágios de integração. Isso é conveniente, pois, por exemplo, a atuação do operador $\exp(c_j h D_T)$ sobre um estado físico $\mathbf{z}_n \equiv \mathbf{z}(t_n)$ corresponde a considerar a evolução desde $t = t_n$ até $t = t_{n+1}$ de um sistema físico cuja Hamiltoniana é $H_j = c_j T(\mathbf{p})$, uma vez que

$$\exp(h D_{H_j}) = \exp(h D_{c_j T}) = \exp(c_j h D_T) \quad (2.20)$$

Agora note que, dada a simplicidade da Hamiltoniana H_j , é possível integrar analiticamente as respectivas equações de Hamilton, de maneira que o mapeamento $\exp(c_j h D_T)$ é obtido. Para ver como isso pode ser feito, considere as equações de movimento associadas à função de Hamilton H_j :

$$\dot{q}_m = \frac{\partial H_j}{\partial p_m} = c_j \frac{\partial}{\partial p_m} [T(\mathbf{p})] \quad (2.21a)$$

$$\dot{p}_m = -\frac{\partial H_j}{\partial q_m} = 0 \quad (2.21b)$$

Como, nesse caso, as componentes do *momentum* são constantes de movimento, a relação

$$\mathbf{p}(t_{n+1}) = \mathbf{p}(t_n) \quad (2.22)$$

segue imediatamente. Para integrar a equação de Hamilton para as coordenadas, defina primeiro a variável dinâmica A tal que:

$$\frac{dA}{dt} = c_j \frac{\partial}{\partial p_m} [T(\mathbf{p})] \quad (2.23)$$

Substituindo a definição acima na Eq. (2.21a) e integrando os dois lados desta desde $t = t_n$ até $t = t_{n+1} = t_n + h$, prova-se a seguinte relação:

$$q_m(t_{n+1}) - q_m(t_n) = A(t_{n+1}) - A(t_n) \approx h \left. \frac{dA}{dt} \right|_{t=t_n} \quad (2.24)$$

onde foi utilizada a aproximação

$$\frac{dA(t)}{dt} \approx \frac{A(t+h) - A(t)}{h} \quad (2.25)$$

que encontra justificativa no fato de que, por construção, $h \ll 1$. Mostra-se, portanto, que, em termos das coordenadas $\mathbf{q}$ e dos seus respectivos *momenta* canônica-

mente conjugados $\mathbf{p}$, a relação

$$\mathbf{z}_{n+1} = \exp(c_j h D_T) \mathbf{z}_n \quad (2.26)$$

é escrita como

$$q_{m,n+1} = q_{m,n} + h c_j \left. \frac{\partial}{\partial p_m} [T(\mathbf{p})] \right|_{t=t_n} \quad (2.27a)$$

$$p_{m,n+1} = p_{m,n} \quad (2.27b)$$

onde $m = 1, \dots, s$ se s representar o número de graus de liberdade do sistema.

A mesma análise pode ser feita para os operadores do tipo $\exp(d_j h D_V)$. Nesse caso, o mapeamento análogo ao da Eq. (2.27) é dado por

$$q_{m,n+1} = q_{m,n} \quad (2.28a)$$

$$p_{m,n+1} = p_{m,n} - h d_j \left. \frac{\partial}{\partial q_m} [V(\mathbf{q})] \right|_{t=t_n} \quad (2.28b)$$

A construção do algoritmo simplético de integração consiste em obter de maneira aproximada o mapeamento $\exp(h D_H)$ como uma certa composição de mapeamentos dos tipos (2.27) e (2.28).

Vamos mostrar agora como essa composição de mapeamentos é construída matematicamente. Considere então dois operadores diferenciais $O_1 \equiv D_{H_1}$ e $O_2 \equiv D_{H_2}$ associados às Hamiltonianas H_1 e H_2 , respectivamente. Além disso, introduza um parâmetro real $\tau > 0$ que obedece a condição $\tau \ll 1$. Afirmamos agora que o operador $\exp[\tau(O_1 + O_2)]$ pode ser fatorado da seguinte maneira:

$$\exp[\tau(O_1 + O_2)] \approx \prod_{j=1}^k \exp(c_j \tau O_1) \exp(d_j \tau O_2) + O(\tau^{n+1}) \quad (2.29)$$

onde k é o número de estágios de integração e deve ser enfatizado que a expressão acima é aproximada, estando correta até a n -ésima ordem em τ . Diz-se que um integrador simplético obtido a partir da última fórmula é um integrador de n -ésima ordem.

Nós provamos que uma construção tal qual a da Eq. (2.29) pode ser feita para

alguns casos através da construção explícita desse produto. Considere, por exemplo, a fatoração do tipo (2.29) correta até a primeira ordem em τ . Fazendo uso da fórmula aproximada

$$\exp(\tau\mathcal{O}) \approx 1 + \mathcal{O}\tau + O(\tau^2) \quad (2.30)$$

onde $\mathcal{O}$ é um operador diferencial qualquer, é direto mostrar que

$$\exp[\tau(O_1 + O_2)] \approx \exp(\tau O_1) \exp(\tau O_2) + O(\tau^2) \quad (2.31)$$

A expressão acima claramente tem a forma da Eq. (2.29) com $k = 1$ e $c_1 = d_1 = 1$.

No entanto, estaremos interessados em integradores simpléticos cuja construção exige que saibamos fatorar $\exp[\tau(O_1 + O_2)]$ até ordens mais altas em τ . Gostáramos de ilustrar uma maneira de obter tais fatorações derivando a fatoração do tipo (2.29) correta até a segunda ordem em τ . Utilizando a expansão de $\exp(\tau\mathcal{O})$ correta até segunda ordem em τ :

$$\exp(\tau\mathcal{O}) \approx 1 + \tau\mathcal{O} + \frac{\tau^2}{2}\mathcal{O}^2 + O(\tau^3) \quad (2.32)$$

é possível verificar que a seguinte fórmula é válida:

$$\begin{aligned} \exp[\tau(O_1 + O_2)] \approx & 1 + \tau O_1 + \tau O_2 + \frac{1}{2}\tau^2 O_1^2 + \frac{1}{2}\tau^2 O_1 O_2 + \frac{1}{2}\tau^2 O_2 O_1 + \\ & + \frac{1}{2}\tau^2 O_2^2 + O(\tau^3) \end{aligned} \quad (2.33)$$

Como ficará provado na sequência, para reconhecer a equação acima como tendo a forma da Eq. (2.29), é necessário tomar $k = 2$. Fazendo repetido uso da Eq. (2.32) e preservando apenas os termos de ordem 2 ou menor, é direto concluir que

$$\begin{aligned} \exp(c_2\tau O_1) \exp(d_2\tau O_2) \exp(c_1\tau O_1) \exp(d_1\tau O_2) \approx & 1 + (c_1 + c_2)\tau O_1 + (d_1 + d_2)\tau O_2 + \\ & + \frac{1}{2}(c_1 + c_2)^2\tau^2 O_1^2 + \frac{1}{2}(d_1 + d_2)^2\tau^2 O_2^2 + (c_1 d_1 + c_2 d_2 + c_2 d_1)\tau^2 O_1 O_2 + \\ & + c_1 d_2\tau^2 O_2 O_1 + O(\tau^3) \end{aligned} \quad (2.34)$$

Comparando as duas últimas equações, vê-se que teremos determinado a fatoração aproximada do tipo (2.29) para o caso sob consideração quando encontrarmos as

constantes reais c_1 , c_2 , d_1 e d_2 satisfazendo o seguinte sistema de equações:

$$c_1 + c_2 = 1 \quad (2.35a)$$

$$d_1 + d_2 = 1 \quad (2.35b)$$

$$c_1 d_1 + c_2 d_2 + c_2 d_1 = \frac{1}{2} \quad (2.35c)$$

$$c_1 d_2 = \frac{1}{2} \quad (2.35d)$$

Note como a última equação exclui a possibilidade de termos uma fatoração com $k = 1$. Nesse caso, precisaríamos ter $c_2 = d_2 = 0$, mas a Eq. (2.35d) mostra que não pode haver soluções para o nosso problema com $d_2 = 0$. Uma escolha das constantes c_j, d_j ($j = 1, 2$) tal que as equações do sistema (2.35) são verificadas é dada por

$$c_1 = c_2 = \frac{1}{2} \quad (2.36a)$$

$$d_1 = 0 \quad (2.36b)$$

$$d_2 = 1 \quad (2.36c)$$

de tal forma que a fatoração aproximada do tipo (2.29) correta até a ordem $n = 2$ em τ é

$$\exp[\tau(O_1 + O_2)] \approx \exp\left(\frac{\tau}{2}O_1\right) \exp(\tau O_2) \exp\left(\frac{\tau}{2}O_1\right) + O(\tau^3) \quad (2.37)$$

O objetivo da exposição acima era mostrar como produtos da forma da Eq. (2.29) podem ser construídos. Deve ficar claro que, se escolhermos abordar o problema de construir as fatorações aproximadas (2.29) da maneira ilustrada acima no caso $n = 2$ para uma ordem n qualquer ($n \geq 1$), a solução sempre virá da resolução de um sistema de equações análogo ao da Eq. (2.35). No entanto, à medida que consideramos esse problema para valores de n cada vez maiores, a complexidade do sistema de equações para c_j, d_j aumenta consideravelmente. O produto (2.29) correto até a ordem $n = 4$ em τ ainda pode ser determinado de modo relativamente simples através do esquema ilustrado acima para $n = 2$ [12]. Para ordens mais altas do que $n = 4$, por outro lado, é necessário utilizar estratégias mais sofisticadas para determinar as constantes c_j, d_j . Essa é uma discussão puramente técnica e será deixada de fora da nossa exposição. O leitor interessado deve consultar o trabalho de Yoshida, Ref. [13], para ver uma solução elegante desse problema.

Uma vez que a obtenção de um algoritmo simplético passa pelo problema de encontrar a fatoração aproximada (2.29) correspondente, devemos fazer algum comentário sobre a solução deste no caso geral. Antes de abordar esse assunto, observamos o seguinte: para construir um integrador simplético com a propriedade de reversibilidade temporal das equações de Hamilton, sempre estaremos interessados no problema de encontrar a fatoração aproximada (2.29) correta até ordem n , onde $n = 2, 4, 6, \dots$, ou seja, para n par. Yoshida mostrou na Ref. [13], através da obtenção explícita das soluções, que a construção da Eq. (2.29) sempre pode ser feita para os casos de interesse em que n é par. Mais precisamente, se n é par, então sempre existe uma escolha de k , c_j e d_j ($j = 1, \dots, k$) tal que a fatoração aproximada da Eq. (2.29) pode ser construída.

Falta agora mostrar como a solução desse problema matemático pode ser usada para obter um esquema de integração numérica de SDHs. Em primeiro lugar, lembre-se de que, como argumentamos, a construção do algoritmo simplético passa pela obtenção do mapeamento

$$\mathbf{z}_{n+1} = \exp(hD_H)\mathbf{z}_n \quad (2.38)$$

que leva o sistema do estado físico $\mathbf{z}_n$ em $t = t_n$ ao estado físico $\mathbf{z}_{n+1}$ em $t = t_{n+1} = t_n + h$, onde $h \ll 1$. Além disso, note que o operador $\exp(hD_H)$ tal como dado na Eq. (2.19) pode ser fatorado da maneira indicada na Eq. (2.29) se fizermos as identificações $\tau = h$, $O_1 = D_T$ e $O_2 = D_V$:

$$\exp[h(D_T + D_V)] \approx \prod_{j=1}^k \exp(c_j h D_T) \exp(d_j h D_V) + O(h^{l+1}) \quad (2.39)$$

de maneira que podemos escrever

$$\mathbf{z}_{n+1} \approx \prod_{j=1}^k \exp(c_j h D_T) \exp(d_j h D_V) \mathbf{z}_n + O(h^{l+1}) \quad (2.40)$$

A equação acima nos diz que uma iteração do integrador simplético de l -ésima ordem, que corresponde a deixar o SDH evoluir durante um intervalo de tempo h , o chamado *comprimento do passo de integração*, é implementada através da composição de $2k$ mapeamentos. Esse procedimento fornece o resultado correto até termos da ordem da l -ésima potência do passo de integração. A Eq. (2.40) revela ainda que, no j -ésimo estágio de integração ($j = 1, \dots, k$), o atual estado do sistema, $\mathbf{z}$, onde $\mathbf{z}$ é

dado por³

$$\mathbf{z} = \prod_{m=1}^{j-1} \exp(c_m h D_T) \exp(d_m h D_V) \mathbf{z}_{\mathbf{n}} \quad (2.41)$$

é mapeado primeiro por (2.28) e depois por (2.27). Dessa maneira, temos que, em termos das coordenadas $\mathbf{q}$ e dos seus respectivos *momenta* $\mathbf{p}$, o j -ésimo estágio de integração consiste em mapear o estado atual do sistema $(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ no estado $(\mathbf{q}', \mathbf{p}')$ através da composição de (2.27) e (2.28):

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}' = \mathbf{p} - h d_j \nabla_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}) \quad (2.42a)$$

$$\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{q}' = \mathbf{q} + h c_j \nabla_{\mathbf{p}} T(\mathbf{p}) \quad (2.42b)$$

onde

$$\nabla_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}) \equiv \left[\frac{\partial V(\mathbf{q})}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial V(\mathbf{q})}{\partial q_s} \right] \quad (2.43)$$

e

$$\nabla_{\mathbf{p}} T(\mathbf{p}) \equiv \left[\frac{\partial T(\mathbf{p})}{\partial p_1}, \dots, \frac{\partial T(\mathbf{p})}{\partial p_s} \right] \quad (2.44)$$

Note que, uma vez que os operadores $\exp(c_j h D_T)$ e $\exp(d_j h D_V)$ não necessariamente comutam, a ordem na Eq. (2.42) deve ser respeitada. Isso significa que os *momenta* $\mathbf{p}$ devem ser mapeados antes das coordenadas $\mathbf{q}$.

Construímos, portanto, o algoritmo simplético de integração de SDHs. O princípio do seu funcionamento está resumido na Eq. (2.40): uma iteração do integrador é feita em k estágios, sendo que o j -ésimo estágio de integração é equivalente a submeter o estado atual do sistema ao mapeamento da Eq. (2.42).

Finalizamos a discussão sobre o algoritmo simplético de integração com um exemplo da utilização deste. O SDH considerado é o chamado *oscilador quártico*. Ele é um sistema com dois graus de liberdade que pode ser obtido da seguinte Hamiltoniana:

$$H = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) + \frac{1}{2}q_1^2 q_2^2 + \frac{1-\alpha}{12}(q_1^4 + q_2^4) \quad (2.45)$$

onde nos restringimos ao caso $\alpha = 0,99$. Como discutiremos mais adiante na Seção 4.4, a função de Hamilton acima pode ser empregada num estudo de termalização em teoria de YM. Neste momento, no entanto, a nossa atenção está na integração numérica do sistema de equações correspondente. É direto verificar que este é dado

³Estamos utilizando a convenção de que $\prod_{m=1}^0 \theta_m \equiv 1$, onde os fatores θ_m são arbitrários.

por

$$\dot{q}_1 = p_1 \quad (2.46a)$$

$$\dot{q}_2 = p_2 \quad (2.46b)$$

$$\dot{p}_1 = -q_1 q_2^2 + \frac{\alpha - 1}{3} q_1^3 \quad (2.46c)$$

$$\dot{p}_2 = -q_2 q_1^2 + \frac{\alpha - 1}{3} q_2^3 \quad (2.46d)$$

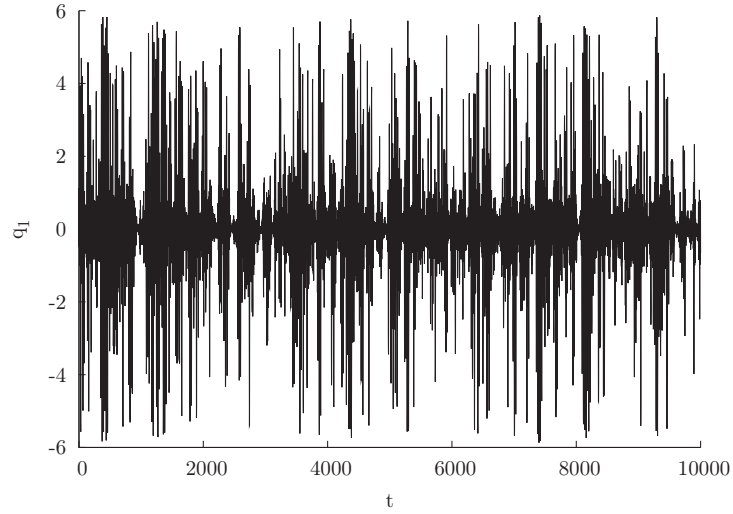


Figura 2.1: Comportamento dinâmico da coordenada generalizada q_1 do oscilador quártico numa situação em que a energia $H = E$ do sistema é dada por $E = 1$.

Nas Figs. 2.1 e 2.2 estão os resultados numéricos da integração do oscilador quártico. A Fig. 2.1 mostra a evolução da coordenada generalizada q_1 numa situação em que a energia $H = E$ do sistema é dada por $E = 1$. O comportamento dinâmico do *momentum* p_1 na mesma situação pode ser visto na Fig. 2.2. As duas figuras foram geradas com o auxílio de um integrador simplético de 4^a ordem.

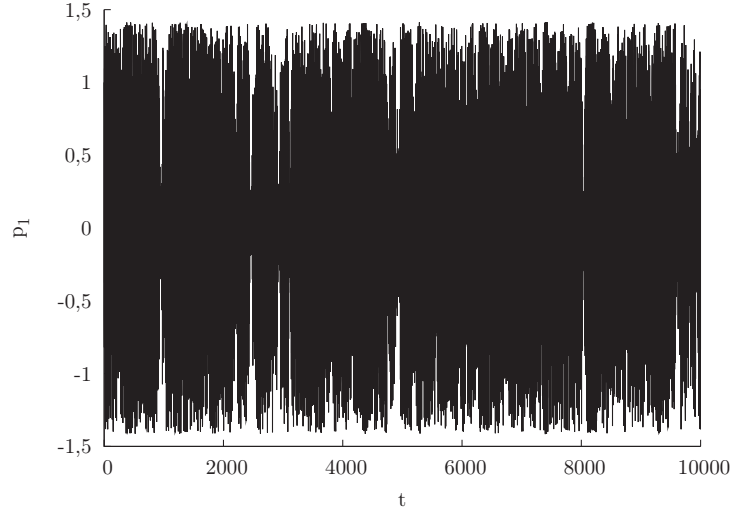


Figura 2.2: Comportamento dinâmico do *momentum* p_1 do oscilador quártico numa situação em que a energia $H = E$ do sistema é dada por $E = 1$.

2.2.2 Mapeamentos Simpléticos

Nos parágrafos acima, desenvolvemos um esquema de integração de equações diferenciais derivadas de uma função Hamiltoniana. Esse esquema foi chamado de um algoritmo simplético de integração. Gostaríamos agora de explicar o motivo de tal denominação. Essa discussão também revelará porque o algoritmo simplético é superior a outros métodos numéricos de resolução de equações diferenciais, como o amplamente usado método de Runge-Kutta de 4ª ordem.

De acordo com o que já foi discutido, fazer uma iteração do integrador simplético corresponde a transformar o estado $(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ do SDH através de uma composição de mapeamentos do tipo

$$\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{q}' = \mathbf{q} + hc_j \nabla_{\mathbf{p}} T(\mathbf{p}) \quad (2.47a)$$

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}' = \mathbf{p} \quad (2.47b)$$

e do tipo

$$\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{q}' = \mathbf{q} \quad (2.48a)$$

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p}' = \mathbf{p} - hd_j \nabla_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}) \quad (2.48b)$$

O algoritmo que apresentamos é, portanto, dito simplético, pois os mapeamentos das duas últimas equações são *mapeamentos simpléticos*. Há mais de uma maneira de introduzir os mapeamentos simpléticos; para uma discussão completa e bastante didática sobre as várias abordagens a essa questão, o leitor interessado pode consultar a Ref. [14]. Para os nossos propósitos, será conveniente considerar a definição de um mapeamento simplético apresentada abaixo.

Seja ψ um mapeamento que leva o estado do sistema $(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ num novo estado $(\mathbf{q}', \mathbf{p}')$, isto é, se s é o número de graus de liberdade do problema, então ψ é a função $\psi : \mathbb{R}^{2s} \rightarrow \mathbb{R}^{2s}$ tal que

$$\begin{bmatrix} \mathbf{q}' \\ \mathbf{p}' \end{bmatrix} = \psi \left(\begin{bmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} \psi_1(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \\ \vdots \\ \psi_{2s}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \end{bmatrix} \quad (2.49)$$

Supondo que as funções $\psi_m : \mathbb{R}^{2s} \rightarrow \mathbb{R}$ ($m = 1, \dots, 2s$) são devidamente bem comportadas de um ponto de vista matemático, é possível definir a matriz Jacobiana J , uma matriz $2s \times 2s$, associada ao mapeamento ψ como aquela cujos elementos J_{im} são dados por

$$J_{im} \equiv \frac{\partial \psi_i}{\partial z_m} \quad (2.50)$$

onde $i, m = 1, \dots, 2s$ e, como sempre, $\mathbf{z} = (\mathbf{q}, \mathbf{p})$. Com base nessa definição, definimos o mapeamento ψ como sendo um mapeamento simplético se a sua matriz Jacobiana satisfizer a condição

$$J^T M^{-1} J = M^{-1} \quad (2.51)$$

onde J^T denota a transposta da matriz Jacobiana e

$$M^{-1} = \begin{bmatrix} 0 & -I_s \\ I_s & 0 \end{bmatrix} \quad (2.52)$$

denota a matriz inversa associada à chamada *matriz simplética* ou *matriz de Poisson* M :

$$M = \begin{bmatrix} 0 & I_s \\ -I_s & 0 \end{bmatrix} \quad (2.53)$$

Nas definições acima, 0 denota a matriz $s \times s$ com todas as suas entradas nulas e I_s representa a matriz identidade $s \times s$.

Antes de falar sobre a vantagem de trabalhar com mapeamentos que possuem a propriedade simplética, Eq. (2.51), gostaríamos de apresentar as condições que garantem que um dado mapeamento é simplético em termos das variáveis canônicas $\mathbf{q}$ e $\mathbf{p}$. Essa discussão tem o objetivo de introduzir um esquema mais direto de verificar se mapeamentos como (2.47) e (2.48) são simpléticos como afirmamos que são.

Utilizando a definição dos elementos da matriz Jacobiana, Eq. (2.50), é direto verificar que a matriz J associada a ψ da Eq. (2.49) pode ser escrita da seguinte maneira:

$$J = \begin{bmatrix} A & C \\ B & D \end{bmatrix} \quad (2.54)$$

onde A , B , C e D são matrizes $s \times s$ dadas por

$$A = \nabla_{\mathbf{q}} \mathbf{q}' \quad (2.55a)$$

$$B = \nabla_{\mathbf{q}} \mathbf{p}' \quad (2.55b)$$

$$C = \nabla_{\mathbf{p}} \mathbf{q}' \quad (2.55c)$$

$$D = \nabla_{\mathbf{p}} \mathbf{p}' \quad (2.55d)$$

A notação usada na última equação significa, por exemplo, que o elemento A_{ij} da matriz A é dado por

$$A_{ij} = \frac{\partial q'_i}{\partial q_j} \quad (2.56)$$

para $i, j = 1, \dots, s$. Se fizermos agora uso do fato de que a matriz transposta J^T é dada por

$$J^T = \begin{bmatrix} A^T & B^T \\ C^T & D^T \end{bmatrix} \quad (2.57)$$

é possível mostrar que a condição de que a transformação ψ seja simplética, Eq. (2.51), é equivalente ao conjunto de condições

$$B^T A = A^T B \quad (2.58a)$$

$$D^T C = C^T D \quad (2.58b)$$

$$D^T A - C^T B = I_s \quad (2.58c)$$

Usando a forma das matrizes A , B , C e D dada na Eq. (2.55), mostra-se que as três condições acima podem ser escritas como

$$(\nabla_{\mathbf{q}}\mathbf{q}')^T(\nabla_{\mathbf{q}}\mathbf{p}') = (\nabla_{\mathbf{q}}\mathbf{p}')^T(\nabla_{\mathbf{q}}\mathbf{q}') \quad (2.59a)$$

$$(\nabla_{\mathbf{p}}\mathbf{q}')^T(\nabla_{\mathbf{p}}\mathbf{p}') = (\nabla_{\mathbf{p}}\mathbf{p}')^T(\nabla_{\mathbf{p}}\mathbf{q}') \quad (2.59b)$$

$$(\nabla_{\mathbf{q}}\mathbf{q}')^T(\nabla_{\mathbf{p}}\mathbf{p}') - (\nabla_{\mathbf{q}}\mathbf{p}')^T(\nabla_{\mathbf{p}}\mathbf{q}') = I_s \quad (2.59c)$$

ou ainda, em termos das componentes das coordenadas $\mathbf{q}$, $\mathbf{q}'$ e das componentes dos momenta $\mathbf{p}$, $\mathbf{p}'$:

$$\frac{\partial p'_j}{\partial q_m} \frac{\partial q'_j}{\partial q_n} - \frac{\partial q'_j}{\partial q_m} \frac{\partial p'_j}{\partial q_n} = 0 \quad (2.60a)$$

$$\frac{\partial p'_j}{\partial p_m} \frac{\partial q'_j}{\partial p_n} - \frac{\partial q'_j}{\partial p_m} \frac{\partial p'_j}{\partial p_n} = 0 \quad (2.60b)$$

$$\frac{\partial p'_j}{\partial p_m} \frac{\partial q'_j}{\partial q_n} - \frac{\partial q'_j}{\partial p_m} \frac{\partial p'_j}{\partial q_n} = \delta_{mn} \quad (2.60c)$$

onde todos os índices nas equações acima variam entre 1 e s . Portanto, para mostrar que os mapeamentos (2.47) e (2.48) têm a propriedade simplética, basta mostrar que as relações dadas na Eq. (2.60) são obedecidas por esses mapeamentos. Apesar do fato de que essa demonstração é bastante direta, esta não é particularmente esclarecedora e omitiremos os seus detalhes. Limitamo-nos a dizer que cada mapeamento do tipo (2.47) ou do tipo (2.48) envolvido numa iteração do integrador simplético é um mapeamento simplético, no sentido de que as relações acima são obedecidas.

Por fim, lembre que uma iteração do integrador é feita através de uma *composição* de mapeamentos, que, agora sabemos, são simpléticos. Isso não é um problema, pois, como é possível provar, o mapeamento obtido por meio de uma composição de mapeamentos simpléticos é também um mapeamento simplético. Essa é a explicação da denominação escolhida para o algoritmo apresentado ao longo da subseção anterior: uma iteração do integrador, que leva o sistema do estado $\mathbf{z}_n$ até o estado $\mathbf{z}_{n+1}$, é um mapeamento simplético de $\mathbf{z}_n$ em $\mathbf{z}_{n+1}$.

Para encerrar a nossa discussão sobre os integradores simpléticos, gostaríamos de mostrar que é a propriedade do algoritmo discutida no parágrafo anterior que garante a sua superioridade em relação, por exemplo, ao método de Runge-Kutta de 4ª ordem. Seja H a função de Hamilton de um SDH autônomo arbitrário. Para um tal sistema, sempre existe a noção de uma superfície de energia, ou seja, de uma super-

fície formada pelos pontos $(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ do espaço de fase tais que o vínculo $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = E$ de constância da Hamiltoniana é respeitado. Agora pense em cada um desses pontos como uma réplica do SDH derivável de H cujo estado físico num determinado instante de tempo é $(\mathbf{q}, \mathbf{p})$. Mais ainda: imagine que cada uma dessas réplicas evolui no tempo a partir desse instante de acordo com a Hamiltoniana H . Aplicando o *teorema de Liouville* [11] à situação que estamos considerando, é possível concluir que, apesar dos pontos $(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ se deslocarem no espaço de fase à medida que o tempo passa, o volume $\Gamma(E)$ da região encerrada pela superfície $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = E$ é *preservado*. Provaremos que o esquema numérico para integrar SDHs que apresentamos é consistente com esse resultado.

Denote por $\mathcal{M}$ o espaço de fase do SDH derivável de H . Seja $\mathcal{D} \subseteq \mathcal{M}$ uma certa região do espaço de fase. O volume desta é dado por

$$\int_{\mathcal{D}} d\mathbf{q} d\mathbf{p} = \int_{\mathcal{D}} dq_1 \dots dq_s dp_1 \dots dp_s \quad (2.61)$$

onde s é o número de graus de liberdade do SDH em questão. Submeta as variáveis canônicas $(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ à ação de um mapeamento ψ como o da Eq. (2.49). Sob a ação de ψ , a região $\mathcal{D}$ é mapeada em $\mathcal{D}' = \psi(\mathcal{D})$. Em termos das novas variáveis $(\mathbf{q}', \mathbf{p}')$, o volume da região $\mathcal{D}'$ é

$$\int_{\mathcal{D}'} d\mathbf{q}' d\mathbf{p}' = \int_{\mathcal{D}'} dq'_1 \dots dq'_s dp'_1 \dots dp'_s \quad (2.62)$$

Fazendo uma mudança de variáveis na integral acima, podemos escrever

$$\int_{\mathcal{D}'} d\mathbf{q}' d\mathbf{p}' = \int_{\mathcal{D}} |\det J| d\mathbf{q} d\mathbf{p} \quad (2.63)$$

onde J denota a matriz Jacobiana associada ao mapeamento ψ .

Agora faremos a suposição de que o mapeamento ψ é simplético, ou seja, suporemos que J tem a propriedade da Eq. (2.51). Antes de seguir, lembramos que o determinante possui as seguintes propriedades:

$$\det(AB) = (\det A)(\det B) \quad (2.64a)$$

$$\det(A^T) = \det A \quad (2.64b)$$

onde A e B são matrizes $r \times r$ arbitrárias (r inteiro, $r \geq 2$). Além disso, é direto verificar que $\det(M^{-1}) = 1$, de tal modo que, calculando o determinante dos dois lados da Eq. (2.51), chega-se a

$$|\det J| = 1 \quad (2.65)$$

Portanto, mapeamentos simpléticos estão de acordo com o teorema de Liouville, pois o volume da região $\mathcal{D}$ é preservado sob a ação de ψ :

$$\int_{\psi(\mathcal{D})} d\mathbf{q}' d\mathbf{p}' = \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{q} d\mathbf{p} \quad (2.66)$$

Em particular, o resultado acima é válido para o mapeamento ψ_I que utilizamos para fazer uma iteração do algoritmo simplético. Esse mapeamento é definido de tal maneira que a expressão formal (2.40) é equivalente a

$$\mathbf{z}_{\mathbf{n}+1} \approx \psi_I(\mathbf{z}_{\mathbf{n}}) + O(h^{l+1}) \quad (2.67)$$

Em termos simples, portanto, podemos dizer que *integradores simpléticos preservam volumes*.

Em geral, não há razão para esperar que um esquema numérico para integrar SDHs obtido sem levar em consideração a estrutura Hamiltoniana das equações também preserve volumes. Um exemplo de método de integração que não preserva volumes é o integrador de Runge-Kutta de 4ª ordem. Um problema associado a tais integradores é a *dissipação numérica*. Formalmente, podemos associar um erro $\delta\Gamma$ a um cálculo hipotético de $\Gamma(E)$ baseado numa simulação feita com um integrador que não preserva volumes. Além disso, é possível encarar a variação do volume de $\Gamma(E)$ para $\Gamma(E) + \delta\Gamma$ como o resultado da variação da energia de E para $E + \delta E$. Supondo que as variações são pequenas, o erro δE no cálculo da energia pode ser estimado com o auxílio da fórmula

$$\delta E \approx \left(\frac{d\Gamma}{dE} \right)^{-1} \delta\Gamma \quad (2.68)$$

Para explicar como isso afetaria as simulações da dinâmica dos nossos sistemas de interesse, introduzimos uma nova hipótese. Especificamente, vamos supor que o volume $\Gamma(E)$ é uma função estritamente crescente de E :

$$\frac{d\Gamma}{dE} > 0, \quad \forall E > 0 \quad (2.69)$$

Os SDHs considerados na MEC usual são exemplos de sistemas para os quais essa suposição é válida, pois, do contrário, não seria possível obter uma temperatura absoluta positiva usando a fórmula de Boltzmann para a entropia. A hipótese (2.69) também é válida para o SDH cuja MEC estudaremos no Capítulo 5.

Então considere, por exemplo, a situação em que $\delta\Gamma < 0$, ou seja, em que os volumes diminuem. Usando (2.69), é direto concluir que $\delta E < 0$, de tal forma que o integrador “dissipa” parte da energia E do SDH que, por hipótese, é conservativo. A dissipação da energia é, portanto, um efeito espúrio causado pelo integrador, o que explica a denominação “dissipação numérica”. Integradores simpléticos são superiores em relação aos que não preservam volumes, pois aqueles conservam a energia (a menos de um erro inerente ao procedimento computacional), minimizando o erro numérico.

2.3 Caos no Sentido de Lyapunov

Como discutiremos no próximo capítulo, é o comportamento caótico das soluções de um dado SDH com poucos graus de liberdade que vai justificar o estudo da MEC deste. Precisamos, dessa maneira, de um meio para quantificar o caos das soluções de um dado sistema dinâmico, ou seja, de um critério de acordo com o qual o comportamento das soluções pode ser sistematicamente classificado como caótico ou regular. O objetivo da presente seção é apresentar o critério que nós usaremos para determinar se um dado sistema dinâmico é caótico ou não. Especificamente, queremos introduzir o conceito do *Expoente Máximo de Lyapunov* (EML).

Grosso modo, dizer que um certo sistema dinâmico pode apresentar comportamento caótico é o mesmo que dizer que o comportamento de uma solução particular desse sistema depende fortemente das condições iniciais às quais ela está associada. Sendo assim, considere duas soluções particulares de um dado sistema dinâmico associadas a condições iniciais ligeiramente diferentes. Quando o sistema for caótico, devido à sensibilidade deste à escolha de uma condição inicial, se deixarmos essas duas soluções evoluírem por um tempo suficientemente longo, veremos que os seus comportamentos se tornaram bastante distintos.

Agora gostaríamos de mostrar como essas ideias podem ser desenvolvidas matematicamente. Para isso, considere o sistema autônomo de equações diferenciais

ordinárias

$$\frac{d\mathbf{z}}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{z}) \quad (2.70)$$

onde t é o parâmetro de evolução (tempo), $\mathbf{z} = \mathbf{z}(t) = [z_1(t), \dots, z_n(t)]^T \in \mathbb{R}^n$ (n inteiro, $n \geq 1$) e $\mathbf{F}(\mathbf{z})$ é uma função devidamente bem comportada de $\mathbf{z}$. A determinação de uma solução particular do sistema dinâmico acima depende da especificação de uma condição inicial $\mathbf{z}(t = t_0) = \mathbf{w}$, onde t_0 é um determinado valor no intervalo de definição do parâmetro de evolução e $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^n$ é um vetor coluna independente de t . Denotaremos por $\phi(t; \mathbf{w})$ a solução do problema de valor inicial que acabamos de definir, ou seja,

$$\frac{d}{dt}[\phi(t; \mathbf{w})] = \mathbf{F}[\phi(t; \mathbf{w})], \quad \phi(t = t_0; \mathbf{w}) = \mathbf{w} \quad (2.71)$$

De acordo com a discussão feita acima, queremos obter uma informação a respeito da caoticidade de um dado sistema dinâmico estudando a divergência de soluções particulares inicialmente próximas, no sentido de que as suas condições iniciais diferem pouco. Sendo assim, considere duas soluções particulares $\mathbf{z}_1$ e $\mathbf{z}_2$ do sistema sob consideração. Além disso, suponha que essas soluções correspondem a condições iniciais ligeiramente diferentes:

$$\mathbf{z}_1 = \phi(t; \mathbf{w}) \quad (2.72a)$$

$$\mathbf{z}_2 = \phi(t; \mathbf{w} + \delta\mathbf{w}) \quad (2.72b)$$

onde $\delta\mathbf{w} \in \mathbb{R}^n$ é um vetor coluna independente de t e $|\delta\mathbf{w}| \ll |\mathbf{w}|$, com $|\cdot|$ denotando a norma Euclidiana do $\mathbb{R}^n$. A separação entre as duas soluções é dada em termos do vetor $\delta\mathbf{z}(t)$, definido por

$$\delta\mathbf{z}(t) \equiv \mathbf{z}_2 - \mathbf{z}_1 = \phi(t; \mathbf{w} + \delta\mathbf{w}) - \phi(t; \mathbf{w}) \quad (2.73)$$

Em primeiro lugar, precisamos saber a equação que determina a evolução da separação $\delta\mathbf{z}(t)$. Uma vez que $\delta\mathbf{w} = \delta\mathbf{z}(t = t_0)$ representa uma pequena separação inicial, utilizamos a seguinte aproximação para a solução $\mathbf{z}_2$ (em termos das suas componentes):

$$z_{2,j} = \phi_j(t; \mathbf{w} + \delta\mathbf{w}) \approx \phi_j(t; \mathbf{w}) + [\nabla_{\mathbf{w}}\phi_j(t; \mathbf{w})] \cdot \delta\mathbf{w} \quad (2.74)$$

onde $j = 1, \dots, n$ e a aproximação acima deixa de fora termos da ordem de $|\delta\mathbf{w}|^2$ ou superior. Dessa maneira, a aproximação feita é sempre razoável desde que a

separação inicial seja suficientemente pequena. Na Eq. (2.74), $\nabla_{\mathbf{w}}\phi_j(t; \mathbf{w})$ denota o vetor

$$\nabla_{\mathbf{w}}\phi_j(t; \mathbf{w}) = \left[\frac{\partial\phi_j(t; \mathbf{w})}{\partial w_1}, \dots, \frac{\partial\phi_j(t; \mathbf{w})}{\partial w_n} \right]^T \quad (2.75)$$

Agora substituímos a Eq. (2.74) na definição (2.73) para obter

$$\delta z_j(t) = z_{2,j} - z_{1,j} \approx [\nabla_{\mathbf{w}}\phi_j(t; \mathbf{w})] \cdot \delta \mathbf{w} \quad (2.76)$$

Diferencie os dois lados da expressão acima em relação ao parâmetro de evolução t :

$$\frac{d}{dt}[\delta z_j(t)] \approx \frac{d}{dt} \{ [\nabla_{\mathbf{w}}\phi_j(t; \mathbf{w})] \cdot \delta \mathbf{w} \} = \nabla_{\mathbf{w}}F_j[\phi(t; \mathbf{w})] \cdot \delta \mathbf{w} \quad (2.77)$$

onde fizemos uso do fato de que $\delta \mathbf{w}$ independe de t , assumimos que $\phi_j(t; \mathbf{w})$ é suficientemente bem comportada de maneira que

$$\left[\nabla_{\mathbf{w}}, \frac{d}{dt} \right] \phi_j(t; \mathbf{w}) = 0 \quad (2.78)$$

e utilizamos a Eq. (2.71). As componentes de $\nabla_{\mathbf{w}}F_j[\phi(t; \mathbf{w})]$ podem ser facilmente calculadas através do uso da regra da cadeia:

$$\frac{\partial F_j[\phi(t; \mathbf{w})]}{\partial w_k} = \frac{\partial F_j(\mathbf{x})}{\partial x_m} \bigg|_{\mathbf{x}=\phi(t; \mathbf{w})} \frac{\partial \phi_m(t; \mathbf{w})}{\partial w_k} \quad (2.79)$$

onde $k = 1, \dots, n$. Substituindo a equação acima na expressão que determina a evolução de $\delta \mathbf{z}(t)$, chegamos a

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}[\delta z_j(t)] &\approx \frac{\partial F_j(\mathbf{x})}{\partial x_m} \bigg|_{\mathbf{x}=\phi(t; \mathbf{w})} \frac{\partial \phi_m(t; \mathbf{w})}{\partial w_k} \delta w_k \\ &\approx M_{jm}[\phi(t; \mathbf{w})] \delta z_m(t) \end{aligned} \quad (2.80)$$

onde

$$M_{jm}[\phi(t; \mathbf{w})] \equiv \frac{\partial F_j(\mathbf{x})}{\partial x_m} \bigg|_{\mathbf{x}=\phi(t; \mathbf{w})} \quad (2.81)$$

é a matriz Jacobiana associada a $\mathbf{F}$ avaliada sobre a solução $\mathbf{z}_1$. O sistema de equações (2.80) determina a evolução da separação $\delta \mathbf{z}(t)$ entre as soluções inicialmente próximas $\mathbf{z}_1$ e $\mathbf{z}_2$; esse sistema é conhecido como o *sistema variacional* associado ao sistema dinâmico (2.70).

Podemos introduzir agora o EML. Tendo em mente que este será calculado nu-

mericamente, introduzimos antes as seguintes variáveis dinâmicas:

$$\boldsymbol{\xi}(t) \equiv \lim_{|\delta\mathbf{z}(0)| \rightarrow 0} \frac{\delta\mathbf{z}(t)}{|\delta\mathbf{z}(0)|} \quad (2.82)$$

onde, por simplicidade, tomamos $t_0 = 0$. Essa troca de variáveis é conveniente do ponto de vista computacional, pois a maneira apropriada de especificar numericamente uma separação inicial $\delta\mathbf{z}(0)$ “pequena o suficiente” não é óbvia. Por outro lado, como é possível concluir a partir da Eq. (2.82), o vetor $\boldsymbol{\xi}(t)$ sempre está normalizado no instante inicial $t = 0$: $|\boldsymbol{\xi}(0)| = 1$. Além disso, o limite na definição acima garante a validade das aproximações usadas na derivação do sistema da Eq. (2.80). Em termos das novas variáveis dadas acima, o sistema variacional da Eq. (2.80) pode ser posto na forma

$$\dot{\boldsymbol{\xi}}(t) = M(t)\boldsymbol{\xi}(t) \quad (2.83)$$

Lembramos que o propósito de definir o EML é obter uma informação a respeito da divergência de soluções inicialmente “próximas”, no sentido discutido mais detalhadamente acima. Abordando essa questão com um olhar mais matemático, observamos primeiro que a separação $\delta\mathbf{z}(t)$ é um vetor no $\mathbb{R}^n$. Como estava implícito na nossa construção, existe uma base ortonormal de $\mathbb{R}^n$, formada pelos versores $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n$, tal que $\delta\mathbf{z}(t)$ pode ser escrito como

$$\delta\mathbf{z}(t) = \delta z_i(t) \mathbf{e}_i \quad (2.84)$$

onde há uma soma sobre o índice repetido i , que varia entre 1 e n . Grosso modo, se estamos considerando a possibilidade das soluções inicialmente próximas divergirem, não há razão para esperar que essa divergência ocorra da mesma maneira nas n direções independentes do $\mathbb{R}^n$. Mais precisamente, admitimos a possibilidade de cada uma das n funções $\delta z_i(t)$ ($i = 1, \dots, n$) crescer a uma taxa exponencial média λ_i . Sem perda de generalidade, supomos que essas taxas exponenciais estão relacionadas da seguinte maneira:

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n \quad (2.85)$$

Para introduzir o EML, utilizamos a suposição de que o crescimento exponencial da norma $|\delta\mathbf{z}(t)|$ do vetor $\delta\mathbf{z}(t)$ acontece a uma taxa dada por $\lambda_1 \equiv \Lambda$. Esta é o que convencionaremos chamar de Expoente Máximo de Lyapunov (EML). Formalmente, este é definido em termos de $\boldsymbol{\xi}$ através de

$$\Lambda \equiv \lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{1}{t} \ln |\boldsymbol{\xi}(t)| \quad (2.86)$$

O valor deste nos permite classificar um dado comportamento como caótico se $\Lambda > 0$. Isso está de acordo com o que foi discutido no início da presente seção, pois significa que as soluções inicialmente próximas divergem. Quando o sistema dinâmico considerado apresenta comportamento regular, o EML é dado por $\Lambda = 0$.

Basicamente, a determinação computacional do EML consiste em resolver numericamente o sistema dinâmico (2.70) juntamente com o sistema variacional correspondente — na forma da Eq. (2.83) — e estimar o valor do limite da equação acima com base nos resultados das simulações. Dizemos que uma “estimativa” é feita, pois Λ não pode ser determinado numericamente no limite $t \rightarrow +\infty$. Consideramos a evolução do sistema dinâmico (2.70) por um tempo t longo, porém finito.

Outro fato que deve ser observado sobre o esquema numérico descrito acima é que o integrador simplético não pode ser usado para determinar o EML quando o sistema dinâmico for Hamiltoniano. Isso é verdade, pois as equações do sistema variacional não possuem a forma de equações de Hamilton. Portanto, não há como construir um algoritmo simplético de integração para elas. Neste trabalho, os cálculos numéricos necessários para estimar o EML foram feitos com o auxílio do integrador de Runge-Kutta de 4ª ordem.

Mais detalhes sobre a determinação numérica do EML podem ser encontrados nas Refs. [15] e [16]. Limitamo-nos a dizer que o cálculo do EML diretamente a partir da sua definição, Eq. (2.86), pode não ser conveniente. Como existe a possibilidade de encontrarmos nos nossos problemas variáveis dinâmicas que crescem a uma taxa exponencial, há o risco da ocorrência de erros de *overflow*, por exemplo. Sendo assim, calcular o EML através da sua definição exige um “truque”. Este é devido a Benettin e colaboradores e está devidamente explicado na Ref. [16]. O resultado da aplicação do esquema desenvolvido por esses autores é que o EML pode ser estimado com o uso da seguinte fórmula:

$$\Lambda \approx \frac{1}{Nh} \sum_{n=1}^N \ln |\xi(t_n)| \quad (2.87)$$

onde utilizamos a mesma notação da Seção 2.2 quando discutimos a discretização do tempo.

Como fizemos na seção anterior, encerramos a nossa discussão com um exemplo

de utilização do método numérico introduzido. Mais uma vez, o sistema dinâmico considerado é o oscilador quártico. As equações de movimento deste já foram apresentadas e são dadas pela Eq. (2.46). Pode-se demonstrar que o sistema variacional associado é

$$\dot{\xi}_1 = \xi_3 \quad (2.88a)$$

$$\dot{\xi}_2 = \xi_4 \quad (2.88b)$$

$$\dot{\xi}_3 = [(\alpha - 1)q_1^2 - q_2^2]\xi_1 - 2q_1q_2\xi_2 \quad (2.88c)$$

$$\dot{\xi}_4 = -2q_1q_2\xi_1 + [(\alpha - 1)q_2^2 - q_1^2]\xi_2 \quad (2.88d)$$

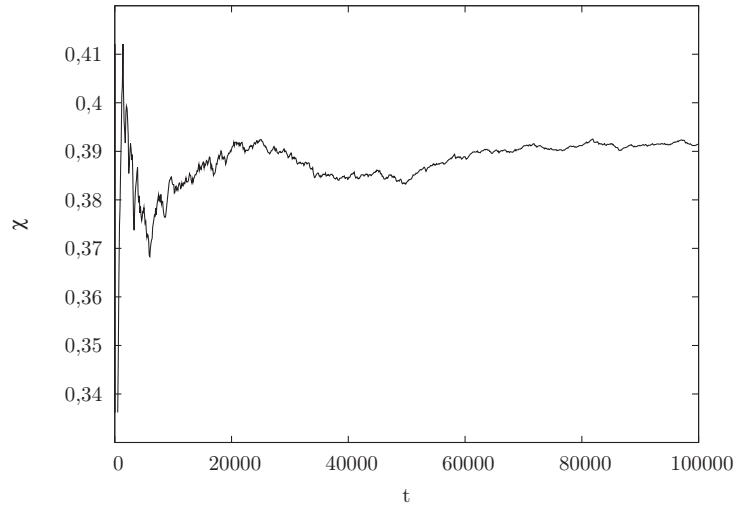


Figura 2.3: Determinação numérica do EML para o oscilador quártico. A função $\chi(t) \equiv \frac{1}{t} \ln |\boldsymbol{\xi}(t)|$ é aquela cujo valor no limite $t \rightarrow +\infty$ é o EML do sistema.

A Fig. 2.3 mostra a função $\chi(t) \equiv \frac{1}{t} \ln |\boldsymbol{\xi}(t)|$ para o oscilador quártico, ou seja, aquela cujo valor no limite $t \rightarrow +\infty$ é o EML desse sistema. Essa figura corresponde a uma situação em que o valor da energia $H = E$ do oscilador é dado por $E = 1$. Nesse caso, o resultado da nossa estimativa do EML é $\Lambda = 0,391$. Como esse valor é positivo, o exemplo que demos é o de um sistema dinâmico que apresenta comportamento caótico.

2.4 Seção de Poincaré

Na seção anterior, discutimos a noção do EML e argumentamos que a determinação numérica deste para um dado sistema dinâmico nos permite classificar a dinâmica

do sistema como “regular” ou “caótica”. Essa é a primeira técnica numérica da qual precisaremos para discutir os nossos resultados na Seção 5.4. O objetivo da presente seção é apresentar a outra técnica numérica que empregaremos para justificar a discussão sobre a MEC de SDHs com poucos graus de liberdade. Especificamente, introduziremos a chamada técnica da superfície de seção de Poincaré ou, simplesmente, a técnica da *seção de Poincaré*.

Antes de falar sobre a técnica que desejamos apresentar, cabe uma breve discussão sobre o que buscamos entender através da aplicação desta. Afirmamos que a seção de Poincaré vai nos fornecer uma informação a respeito da ergodicidade de um dado SDH. Mais precisamente, usaremos os resultados numéricos obtidos através da construção computacional da seção de Poincaré para *definir* o significado de “ergodicidade” no contexto deste trabalho.

Com relação à noção de “ergodicidade”, observamos que esta é definida num sentido matemático preciso no contexto da teoria conhecida como “teoria ergódica”. Para uma introdução bastante didática a esse assunto e uma discussão sobre os seus conceitos em conexão com as teorias de *gauge*, o leitor pode consultar a Ref. [17]. Enfatizamos que a nossa abordagem é numérica.

Obter êxito na busca por SDHs ergódicos e com um espaço de fase de baixa dimensionalidade⁴ para os quais podemos estender a MEC passa pela nossa capacidade de “testar” a validade da hipótese ergódica. Na MEC usual, isso nunca pode ser feito diretamente, pois, em primeiro lugar, não há como representar num gráfico um espaço de fase com uma dimensionalidade suficientemente alta (no caso em questão, da ordem do número de Avogadro) e, segundo, porque na prática a tarefa de descrever completamente a dinâmica de um sistema termodinâmico típico no espaço de fase não pode ser realizada nem com o auxílio de um computador. Dessa maneira, a ergodicidade na MEC usual é uma hipótese cuja validade é verificada *a posteriori* e que é, no nosso ponto de vista, justificada pelo sucesso da teoria de Boltzmann.

No caso de sistemas com poucos graus de liberdade, por outro lado, é possível usar um computador para estudar completamente (no sentido de que todas as variáveis dinâmicas são conhecidas durante todo o período de evolução considerado) a dinâmica dos sistemas de interesse e representar graficamente porções do espaço de fase

⁴Como argumentaremos no Capítulo 3, o número mínimo de dimensões é 4.

através da chamada técnica da seção de Poincaré. Essa técnica é aplicável a sistemas com 2 graus de liberdade (isto é, sistemas cuja descrição é feita com base em 2 coordenadas generalizadas q_1, q_2 e nos respectivos *momenta* canonicamente conjugados p_1, p_2) e consiste em escolher uma superfície no espaço de fase, como, por exemplo, a superfície $q_1 = 0$, deixar o sistema evoluir no tempo a partir de um estado inicial que pertence à superfície escolhida e registrar os pares ordenados (q_2, p_2) cada vez que o estado do sistema cruzar a superfície de Poincaré com o *momentum* p_1 tendo um determinado sinal (por exemplo, $p_1 > 0$). Somos, portanto, capazes de representar graficamente o que acontece em regiões bidimensionais da superfície de energia tridimensional (em geral), formada pelos estados físicos que um SDH autônomo com um espaço de fase quadridimensional pode acessar.

A determinação computacional da seção de Poincaré nos permite “testar” a hipótese ergódica, pois, em termos simples, com aquela podemos olhar para uma região do espaço de fase fisicamente acessível do sistema considerado. Quando a figura obtida através da representação gráfica dos pares ordenados do parágrafo acima tem uma densidade grande de pontos, convencionaremos chamar o sistema dinâmico de *ergódico*. Mais detalhes sobre a interpretação da ergodicidade que acabamos de descrever são apresentados no Capítulo 3, onde discutimos a conexão entre caos e ergodicidade.

Capítulo 3

Mecânica Estatística de Berdichevsky

3.1 Caos e Ergodicidade

A formulação da MEC está fundamentada na descrição de Hamilton da Mecânica Clássica. Dessa maneira, quando falamos em estender a teoria usual da MEC para sistemas com poucos graus de liberdade, estamos considerando a possibilidade de construir uma teoria estatística para SDHs ergódicos com poucos graus de liberdade. Ao considerar uma tal possibilidade, primeiro devemos responder duas questões: existem SDHs que ao mesmo tempo são ergódicos e têm um espaço de fase de baixa dimensionalidade? E, se tais sistemas existirem, qual é o mecanismo responsável pela dinâmica ergódica desses sistemas?

A primeira pergunta parece, a princípio, ter uma resposta negativa. Afinal de contas, a maior parte dos SDHs com poucos graus de liberdade tratados nos textos introdutórios (como, por exemplo, o oscilador harmônico simples) tem uma dinâmica regular. De fato, existe um teorema devido a Arnold [18] sobre a integrabilidade de SDHs que nos permite concluir que todos os SDHs para os quais o espaço de fase é bidimensional (ou seja, que são descritos através de apenas um par de variáveis canonicamente conjugadas) e que têm a Hamiltoniana como uma constante de movimento são integráveis. Como a dinâmica de um sistema integrável é regular, isso significa que devemos considerar SDHs com pelo menos 2 graus de liberdade se quisermos encontrar um sistema com a capacidade de apresentar uma dinâmica ergódica e que pode ser descrito estatisticamente de acordo com as prescrições de Berdichevsky¹.

Os primeiros candidatos a modelos que admitem um estudo baseado nessa “nova”

¹Lembre que o sistema deve ser autônomo.

formulação da MEC são aqueles para os quais a técnica da seção de Poincaré foi testada pela primeira vez, pois, como discutimos, esta nos permite dizer algo sobre a ergodicidade de um dado SDH. Um trabalho muito importante no contexto dos SDHs autônomos é devido a M. Hénon e C. Heiles [19]. O sistema considerado por eles consiste num par de osciladores harmônicos simples acoplados através de termos cúbicos nas coordenadas generalizadas. Hénon e Heiles aplicaram a técnica da seção de Poincaré ao seu sistema de osciladores acoplados e mostraram que, dependendo do valor constante da energia deste, não só o seu espaço de fase exibe regiões de dinâmica ergódica como essas regiões podem coexistir com outras onde o sistema apresenta uma dinâmica regular. Numa situação desse tipo, usaremos dizer que o sistema apresenta uma dinâmica “quase ergódica”. Enfatizamos, no entanto, que existe uma faixa de valores de energia para os quais a dinâmica é ergódica no sentido de Boltzmann (as regiões de dinâmica regular desaparecem e um estado do sistema pode percorrer o espaço de fase acessível, cobrindo uniformemente a seção de Poincaré).

Queremos aproveitar a discussão do parágrafo acima para esclarecer porque utilizamos a definição de ergodicidade do capítulo anterior. Mais precisamente, gostaríamos de provar que o sistema de Hénon-Heiles é ergódico no sentido que definimos. A função de Hamilton deste é dada por

$$H = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) + \frac{1}{2}(q_1^2 + q_2^2) + q_1^2 q_2 - \frac{1}{3}q_2^3 \quad (3.1)$$

As equações dinâmicas derivadas dessa Hamiltoniana são

$$\dot{q}_1 = p_1 \quad (3.2a)$$

$$\dot{q}_2 = p_2 \quad (3.2b)$$

$$\dot{p}_1 = -q_1(2q_2 + 1) \quad (3.2c)$$

$$\dot{p}_2 = q_2^2 - q_2 - q_1^2 \quad (3.2d)$$

A Fig. 3.1 mostra a seção de Poincaré do sistema introduzido acima no caso em que $H = E = \frac{1}{6}$. Note como o plano mostrado está preenchido por pontos. Isso nos permite inferir que um estado físico do sistema de Hénon-Heiles visita uma parte do espaço de fase com volume comparável ao da maior região fisicamente acessível. Esse SDH é, portanto, um exemplo de sistema ergódico de acordo com a nossa definição de ergodicidade. O leitor é direcionado à Ref. [20] para uma análise da MEC do

sistema de Hénon-Heiles. O sucesso de um tal estudo indica que a definição de ergodicidade utilizada neste trabalho é razoável.

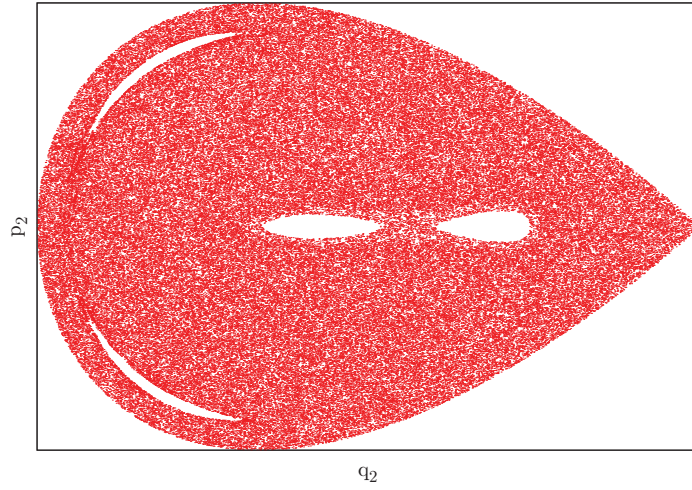


Figura 3.1: Seção de Poincaré do sistema de Hénon-Heiles no caso em que $H = E = \frac{1}{6}$.

O sistema de Hénon-Heiles é, portanto, um exemplo de SDH com poucos graus de liberdade capaz de apresentar dinâmica ergódica. Permanece, no entanto, a questão da origem da ergodicidade em casos assim. Para discutir esse assunto, considere mais uma vez o caso do oscilador quártico. Este, assim como o sistema de Hénon-Heiles, pode exibir um comportamento dinâmico tal que regiões de movimento regular coexistem no espaço de fase com regiões de movimento ergódico. Para ver a seção de Poincaré desse sistema, o leitor é direcionado ao trabalho de Bannur e colaboradores [2]. Como mostramos num exemplo do Capítulo 2, o oscilador quártico é um SDH capaz de apresentar comportamento caótico. Sendo assim, a origem da ergodicidade é, nesse caso, a *não-linearidade* das equações de movimento, que se manifesta aqui através do *comportamento caótico* das soluções consideradas. O mesmo pode ser dito sobre o sistema de Hénon-Heiles. Dessa maneira, as duas questões que nós fizemos parecem ter sido respondidas:

Existem SDHs que, ao mesmo tempo, são ergódicos e possuem um espaço de fase de baixa dimensionalidade. Dois exemplos são o oscilador quártico e o de Hénon-Heiles, ambos com espaços de fase quadridimensionais, os de dimensão mais baixa no caso de sistemas Hamiltonianos onde ergodicidade pode ser observada. Além disso, o mecanismo responsável pela dinâmica ergódica desses sistemas é a não-linearidade

das respectivas equações de movimento, que se manifesta através do comportamento caótico das soluções destas. Grosso modo, portanto, é o caos que assume na MEC com poucos graus de liberdade o papel que as colisões desempenham na MEC ordinária.

3.2 Formulação de Berdichevsky da Mecânica Estatística

Hipóteses

Seja H a função Hamiltoniana de um SDH autônomo e ergódico. Como foi discutido na Seção 2.2, o fato de que o sistema é autônomo decorre da inexistência de uma dependência explícita de H no parâmetro de evolução t . Sendo assim, temos que

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t} = 0 \quad (3.3)$$

de modo que a Hamiltoniana de um SDH autônomo é uma constante de movimento. Dessa maneira, a importância da hipótese de que o sistema dinâmico considerado é autônomo está na noção de que há uma energia conservada na sua descrição.

A hipótese de que o sistema dinâmico considerado é ergódico é necessária pelos motivos discutidos no Capítulo 1: o estado do sistema visita todos os pontos fisicamente acessíveis do espaço de fase; sendo assim, médias temporais de variáveis dinâmicas podem ser calculadas como médias no espaço de fase.

Grandeza Fundamental

Denote por E o valor constante que a função de Hamilton assume. De um ponto de vista geométrico, a condição de constância de H restringe os pontos (estados físicos) acessíveis no espaço de fase do sistema à chamada *superfície de energia*, definida pela condição

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = E \quad (3.4)$$

onde $\mathbf{q}$ e $\mathbf{p}$ são as coordenadas generalizadas e os *momenta* canonicamente conjugados do sistema, respectivamente.

A grandeza fundamental da formulação de Berdichevsky [1] da MEC é o volume

$\Gamma(E)$ encerrado pela superfície de energia:

$$\Gamma(E) = \frac{1}{h^s} \int_{H \leq E} d\mathbf{q} d\mathbf{p} \quad (3.5)$$

onde s (s inteiro, $s \geq 1$) é o número de graus de liberdade do sistema, $d\mathbf{q} = dq_1 \dots dq_s$ e $d\mathbf{p} = dp_1 \dots dp_s$. Na Eq. (3.5), h é uma constante com dimensão de coordenada vezes *momentum*. Na prática, sempre escolheremos as escalas das grandezas físicas de tal forma que $h = 1$, mas a sua presença em (3.5) é necessária para que as equações que apresentaremos a seguir estejam dimensionalmente corretas.

Formulação de Boltzmann

Precisamos explicar porque a quantidade definida na Eq. (3.5) é tão importante. Para fazer isso, primeiro consideramos a formulação de Boltzmann da MEC. De acordo com essa formulação, a *entropia* S_u de um sistema que está em equilíbrio termodinâmico é dada por

$$S_u(E) = \ln \Omega(E) \quad (3.6)$$

onde $\Omega(E)$ denota a área da superfície de energia $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = E$. Como é usual na MEC [5], definimos a área $\Omega(E)$ de tal forma que

$$\Gamma(E + \delta E) - \Gamma(E) \equiv \Omega(E) \delta E \quad (3.7)$$

onde temos em mente o limite $\delta E \rightarrow 0^+$. Isso é equivalente à seguinte equação:

$$\Omega(E) = \frac{\partial \Gamma(E)}{\partial E} \quad (3.8)$$

Note que, da maneira como definimos a área da superfície de energia, esta é uma quantidade com dimensão de inverso da energia. Isso significa que a definição de $\Omega(E)$ dada acima não está inteiramente correta, pois, para que a Eq. (3.6) tenha sentido, $\Omega(E)$ deve ser adimensional. Esse problema poderia ser facilmente resolvido através da inclusão de um fator constante com dimensão de inverso da energia no lado direito da Eq. (3.7). Em outras palavras, poderíamos definir uma “área adimensional” $\Omega_a(E)$ usando a seguinte relação:

$$\Omega_a(E) \equiv h^r \frac{\partial \Gamma(E)}{\partial E} \quad (3.9)$$

onde a potência r é escolhida de tal maneira que $[\Omega_a(E)] = 1$. Por exemplo, para o SDH derivável da função de Hamilton (5.43), que discutiremos no Capítulo 5, tomaríamos $r = \frac{4}{3}$. No entanto, como é possível concluir a partir da Eq. (3.6), a substituição de $\Omega(E)$ por $\Omega_a(E)$ nessa fórmula fornece uma definição equivalente de $S_u(E)$, uma vez que a entropia na MEC está definida a menos de uma constante aditiva arbitrária. Portanto, é justificável escrever simplesmente

$$S_u(E) = \ln \frac{\partial \Gamma(E)}{\partial E} \quad (3.10)$$

Fisicamente, $\Omega(E)$ representa o número de microestados associados ao macroestado de energia constante E . Chega-se a essa conclusão através da observação de que um ponto sobre a superfície de energia pode ser encarado como um estado físico consistente com o vínculo $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = E$. Sendo assim, o cálculo da área da superfície em questão corresponde a uma contagem dos pontos sobre ela, ou seja, dos microestados caracterizados pela energia E .

A fórmula de Boltzmann estabelece uma relação entre a entropia $S_u(E)$ e o número de microestados $\Omega(E)$. A proposta de uma tal relação pode ser justificada através da observação de que a entropia definida na Eq. (3.6) possui todas as propriedades da entropia definida na Termodinâmica [5]. Especificamente, $S_u(E)$ na Eq. (3.6) é uma grandeza extensiva e está de acordo com a restrição imposta pela segunda lei da Termodinâmica. Sendo assim, podemos interpretar a primeira afirmação feita neste parágrafo dizendo que a fórmula de Boltzmann estabelece uma conexão entre a dinâmica (representada pela área no espaço de fase que fornece o número de microestados) e a Termodinâmica (representada pela entropia).

A relação dada na Eq. (3.6) é considerada uma das mais importantes da Física, pois, como o leitor pode ver na Ref. [5], permite que nós derivemos a primeira e a segunda leis da Termodinâmica. Em particular, para provar que a primeira lei é válida utilizando os princípios da MEC, também é necessário definir a temperatura e a pressão em termos do número de microestados. Vamos nos concentrar na definição de temperatura. É possível demonstrar que, para que S_u possa ser reconhecida como a entropia termodinâmica, a temperatura absoluta T_u deve ser dada por

$$\frac{1}{T_u} = \frac{\partial S_u}{\partial E} \quad (3.11)$$

Equivalentemente, podemos escrever

$$T_u(E) \equiv \left\{ \frac{\partial}{\partial E} \left[\ln \left(\frac{\partial \Gamma}{\partial E} \right) \right] \right\}^{-1} \quad (3.12)$$

A expressão acima corresponde à definição usual da temperatura na MEC. A sua validade está muito bem estabelecida para SDHs com um número grande de graus de liberdade.

Como já foi discutido no Capítulo 1, estaremos interessados em calcular temperaturas dinamicamente, isto é, à medida que as equações de movimento do SDH são integradas numericamente. Sendo assim, introduzimos agora a noção de uma *temperatura dinâmica*. Seja T a temperatura — de acordo com uma definição qualquer — de um dado SDH que se encontra no equilíbrio termodinâmico. Formalmente, definimos a temperatura dinâmica correspondente $T_{din} = T_{din}(t)$ como sendo a função do tempo tal que

$$T = \lim_{t \rightarrow +\infty} T_{din}(t) \quad (3.13)$$

Dizemos que essa é uma construção formal, pois o limite na equação acima só é necessário para garantir que o SDH tenha tido tempo para atingir o equilíbrio.

A temperatura dinâmica $T_{u,din}$ associada à temperatura T_u é

$$T_{u,din} = \frac{1}{\langle \Phi \rangle} \quad (3.14)$$

onde $\langle f \rangle$ denota a média temporal de f , definida por

$$\langle f \rangle \equiv \frac{1}{t} \int_0^t dt' f(t') \quad (3.15)$$

e a função Φ é dada por

$$\Phi = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla H}{|\nabla H|^2} \right) \quad (3.16)$$

Na última equação, ∇ representa o gradiente no espaço de fase. Por exemplo, para um SDH com apenas 1 grau de liberdade, temos $\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial q}, \frac{\partial}{\partial p} \right)$. Uma discussão mais detalhada sobre a temperatura dinâmica $T_{u,din}$ pode ser encontrada na Ref. [21].

Formulação de Berdichevsky

Como já foi discutido, Berdichevsky considerou a possibilidade de estender a formulação de Boltzmann da MEC para SDHs autônomos, ergódicos e com poucos graus de liberdade. Antes de falar sobre a necessidade de reformular essa teoria para contemplar sistemas com um espaço de fase de baixa dimensionalidade, gostaríamos de analisar mais cuidadosamente a questão de como a entropia deve ser definida na MEC. Na Ref. [1], Berdichevsky começa observando que a definição de Boltzmann para $S = S_u$, Eq. (3.6), não está em total acordo com a entropia considerada na Termodinâmica.

Considere o exemplo de um gás clássico confinado num recipiente com paredes adiabáticas, ou seja, tais que o gás não troca calor com o resto do Universo. Se o volume V do recipiente permanecer fixo (de modo que não há trabalho sendo realizado), então, de acordo com a primeira lei da Termodinâmica, a energia interna E do gás não se altera. Agora imagine que nós variaremos lentamente o volume V . Trabalho será realizado e a energia E do gás mudará. No entanto, devido à natureza das paredes do recipiente, esse é um processo adiabático. De acordo com a Termodinâmica, existe uma grandeza chamada entropia que permanece constante durante o processo descrito acima.

À luz da Física do processo termodinâmico discutido no parágrafo anterior, revisitamos a definição de entropia na MEC. Para fazer isso, analisamos uma situação mais abstrata. Considere um SDH autônomo e ergódico cuja função de Hamilton H depende, como antes, das coordenadas generalizadas $\mathbf{q}$ e dos respectivos *momenta* $\mathbf{p}$; além disso, vamos supor que a Hamiltoniana desse sistema tem uma dependência num conjunto de parâmetros externos, que denotaremos por ζ . Portanto, quando afirmamos que o SDH é autônomo, queremos dizer que, para parâmetros externos fixos $\zeta = \zeta_0$, a Hamiltoniana é uma constante de movimento. Sendo assim, a condição $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}; \zeta = \zeta_0) = E$ define uma superfície de energia do sistema.

Agora considere a questão de definir a entropia para o SDH do parágrafo acima. Da mesma maneira que Boltzmann fez ao escrever a fórmula (3.6), propomos que a entropia $S = S(E, \zeta)$ deve ser dada por uma relação do tipo

$$S(E, \zeta) = \ln G(E, \zeta) \tag{3.17}$$

onde $G(E, \zeta)$ denota uma certa quantidade geométrica associada ao espaço de fase do SDH. Assim como fizemos no caso em que $G(E, \zeta)$ é a área $\Omega(E, \zeta)$ da superfície de energia $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}; \zeta) = E$, interpretamos $G(E, \zeta)$ no caso geral como uma medida do número de microestados correspondentes ao macroestado caracterizado por E e ζ . Sendo assim, $G(E, \zeta)$ deve ser uma função estritamente positiva dos seus argumentos:

$$G(E, \zeta) > 0, \quad \forall E > 0, \zeta \quad (3.18)$$

A desigualdade acima também deve ser verdadeira para que a entropia $S(E, \zeta)$ esteja bem definida matematicamente. Outra condição que a função $G(E, \zeta)$ deve respeitar é a seguinte:

$$\frac{\partial G}{\partial E} > 0, \quad \forall E > 0, \zeta \quad (3.19)$$

A restrição acima precisa ser imposta, pois iremos querer utilizar a relação (3.17) para definir a temperatura absoluta T do sistema através de

$$\frac{1}{T} \equiv \frac{\partial S}{\partial E} \quad (3.20)$$

em analogia ao que foi feito usando a fórmula de Boltzmann para a entropia. A desigualdade (3.19) é o que garante que a temperatura absoluta definida através da última equação sempre será positiva quando o SDH tiver uma energia não-nula.

A contribuição de Berdichevsky foi ter notado que, para que a entropia definida na Eq. (3.17) tenha um comportamento tão semelhante ao da entropia termodinâmica quanto possível, existe uma terceira restrição que deve ser imposta à função $G(E, \zeta)$. Em analogia com o caso discutido acima de um gás clássico confinado num recipiente com paredes adiabáticas, exige-se que, se variarmos lentamente os parâmetros externos ζ , a entropia $S(E, \zeta)$ permaneça constante. Obviamente, isso será verdade somente se a função $G(E, \zeta)$ apresentar esse mesmo comportamento. Usando o jargão da teoria de sistemas Hamiltonianos, exige-se, portanto, que a quantidade geométrica $G(E, \zeta)$ associada ao espaço de fase do SDH seja um *invariante adiabático*.

Finalmente, somos capazes de explicar porque a quantidade definida na Eq. (3.5) é a grandeza fundamental da formulação de Berdichevsky da MEC. Supondo, sem perda de generalidade, que a constante h seja estritamente positiva, o volume $\Gamma(E, \zeta)$ encerrado pela superfície de energia $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}; \zeta) = E$ possui todas as boas propriedades

que exigimos de $G(E, \zeta)$. Para ver uma demonstração de que $\Gamma(E, \zeta)$ é um invariante adiabático, o leitor pode consultar a Ref. [22]. A fórmula de Berdichevsky para a entropia $S_B(E, \zeta)$ é obtida a partir da Eq. (3.17) quando tomamos $G(E, \zeta) = \Gamma(E, \zeta)$:

$$S_B(E, \zeta) = \ln \Gamma(E, \zeta) \quad (3.21)$$

Como discutiremos mais detalhadamente na próxima seção, a fórmula acima nos permite obter uma descrição estatística para SDHs autônomos, ergódicos e com poucos graus de liberdade que está de acordo com os resultados das simulações computacionais. Além disso, observamos que o volume $\Gamma(E)$ para os SDHs estudados no contexto da MEC usual tem uma dependência em E do tipo

$$\Gamma(E) \propto E^{\gamma s} \quad (3.22)$$

onde γ é uma certa constante real estritamente positiva da ordem de 1 e s denota o número de graus de liberdade do sistema². Sendo assim, uma vez que para esses sistemas, por hipótese, temos $s \gg 1$, podemos escrever

$$\Omega(E) \propto E^{\gamma s - 1} \approx E^{\gamma s} \quad (3.23)$$

Desse modo, para SDHs com muitos graus de liberdade, vale a seguinte aproximação:

$$S_B(E, \zeta) \approx S_u(E, \zeta), \quad s \gg 1 \quad (3.24)$$

Isso significa que é possível obter os resultados bem estabelecidos da MEC usual através da fórmula (3.21) para a entropia S_B . Portanto, a formulação de Berdichevsky da MEC é realmente uma extensão da formulação de Boltzmann, pois aquela se aplica a todos os SDHs autônomos e ergódicos, independentemente do número de graus de liberdade.

A partir da Eq. (3.21), diferenciando a entropia em relação à energia, é direto obter a temperatura de Berdichevsky T_B . Esta é dada por

$$T_B(E) \equiv \left\{ \frac{\partial}{\partial E} [\ln \Gamma(E)] \right\}^{-1} \quad (3.25)$$

²Um exemplo bastante conhecido para o qual uma relação desse tipo é válida é o gás clássico ideal [5]. Nesse caso, prova-se que $\gamma = \frac{1}{2}$.

Berdichevsky demonstrou na Ref. [1] que a temperatura dada na equação acima é consistente com um teorema de equipartição da energia. Dessa maneira, temos $2s$ definições equivalentes $T_{B,din}^{(i)}$ para a temperatura dinâmica associada à temperatura T_B :

$$T_{B,din}^{(i)} = \left\langle z_i \frac{\partial H}{\partial z_i} \right\rangle, \quad i = 1, \dots, 2s \quad (3.26)$$

onde $\mathbf{z} = (\mathbf{q}, \mathbf{p})$.

As hipóteses e expressões consideradas por Berdichevsky foram testadas numericamente por Berdichevsky e Alberti para o sistema de Hénon-Heiles num artigo subsequente [20]. Eles mostraram que as previsões dessa MEC estendida se confirmam a menos de um erro associado ao procedimento numérico.

Bannur foi o primeiro a comparar as duas definições de temperatura através de simulações computacionais [7]. Ele considerou as diferentes definições para o oscilador quártico e para o sistema de Hénon-Heiles. Nos dois casos considerados, a definição usual de temperatura fornece resultados maiores em comparação com aqueles obtidos através da definição de temperatura devida a Berdichevsky. Em particular, Bannur mostrou que para o oscilador quártico a temperatura usual é três vezes maior do que a temperatura de Berdichevsky. Obviamente, esse é um fenômeno característico de SDHs com poucos graus de liberdade.

3.3 Exemplo: Oscilador Quártico

Para mostrar que a formulação de Berdichevsky da MEC fornece as previsões corretas para um SDH com poucos graus de liberdade no equilíbrio termodinâmico, consideramos novamente o exemplo do oscilador quártico. Em primeiro lugar, a partir da expressão para a Hamiltoniana desse sistema, Eq. (2.45), é possível concluir que esse é um SDH autônomo. Além disso, num exemplo do Capítulo 2, provamos que o oscilador quártico é um sistema capaz de exibir comportamento caótico. Apesar de não termos mostrado a seção de Poincaré correspondente neste trabalho³, argumentamos que nesse caso o caos pode se manifestar através de uma dinâmica ergódica por parte do oscilador. Sendo assim, o oscilador quártico é um SDH autônomo e ergódico, de tal forma que, em princípio, pode ter a sua MEC de equilíbrio descrita com o auxílio da formulação de Berdichevsky dessa teoria.

O que garante a aplicabilidade das fórmulas propostas por Berdichevsky ao caso do oscilador quártico é o fato de que o volume $\Gamma(E)$ é finito para energias $E \geq 0$ finitas. De fato, Bannur demonstrou na Ref. [7] que para o sistema sob consideração temos

$$\Gamma(E) = CE^{3/2} \quad (3.27)$$

onde C independe da energia E , mas é uma função do parâmetro α que aparece na função de Hamilton (2.45). Como veremos abaixo, a forma de $C = C(\alpha)$ não é importante para os cálculos de temperatura. Observamos, no entanto, que $C(\alpha)$ diverge no limite $\alpha \rightarrow 1^-$. Em outras palavras, a MEC do oscilador quártico não pode ser estudada no caso em que o parâmetro α é $\alpha = 1$.

Conhecendo a expressão para o volume encerrado pela superfície de energia $H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = E$, Eq. (3.27), é direto calcular as temperaturas do sistema quando este se encontra em equilíbrio termodinâmico. Calculando a temperatura $T_u(E)$ do oscilador quártico de acordo com a definição usual dessa grandeza, obtemos

$$T_u(E) \equiv \left\{ \frac{\partial}{\partial E} \left[\ln \left(\frac{\partial \Gamma}{\partial E} \right) \right] \right\}^{-1} = 2E \quad (3.28)$$

A temperatura $T_B(E)$ de acordo com a definição de Berdichevsky é dada por

$$T_B(E) \equiv \left\{ \frac{\partial}{\partial E} [\ln \Gamma(E)] \right\}^{-1} = \frac{2}{3}E \quad (3.29)$$

Observe que a temperatura (3.28), calculada utilizando a definição usual, é realmente três vezes maior do que a temperatura de Berdichevsky (3.29), como foi afirmado no final da última seção.

A validade da Eq. (3.29) é garantida pelo resultado das simulações numéricas. Considere, por exemplo, a situação em que $E = 1$. Nesse caso, a Eq. (3.29) nos permite concluir que, se esperarmos por um tempo longo o bastante para que o SDH sob consideração atinja o equilíbrio termodinâmico, a seguinte relação será verdadeira:

$$\left\langle p_i \frac{\partial H}{\partial p_i} \right\rangle = \langle p_i^2 \rangle = \frac{2}{3}, \quad i = 1, 2 \quad (3.30)$$

³A seção de Poincaré para o oscilador quártico numa situação em que o comportamento deste é ergódico pode ser vista na Ref. [2].

Para testar a validade da última equação, podemos integrar numericamente as equações de movimento para o oscilador quártico tomando $E = 1$. Em posse das soluções numéricas das equações para p_1 e p_2 , somos capazes de calcular as temperaturas dinâmicas $T_{B,din}^{(1)} = \langle p_1^2 \rangle$ e $T_{B,din}^{(2)} = \langle p_2^2 \rangle$. Então basta verificar se, a menos de um erro inerente ao cálculo numérico, a seguinte equação é válida:

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} T_{B,din}^{(i)} = \frac{2}{3}, \quad i = 1, 2 \quad (3.31)$$

onde o limite indica que a evolução do oscilador é considerada por um tempo longo. Observamos que esse esquema também nos permite testar a validade da hipótese ergódica para o SDH que estamos analisando. Isso é verdade, pois a Eq. (3.30) é obtida encarando as médias nessa expressão como médias no espaço de fase, enquanto que realizamos a determinação numérica destas como médias temporais. Sendo assim, se demonstrarmos — usando o esquema descrito acima — que a Eq. (3.30) é válida, também teremos demonstrado para esse caso particular que, no equilíbrio termodinâmico, médias no espaço de fase e médias temporais são equivalentes.

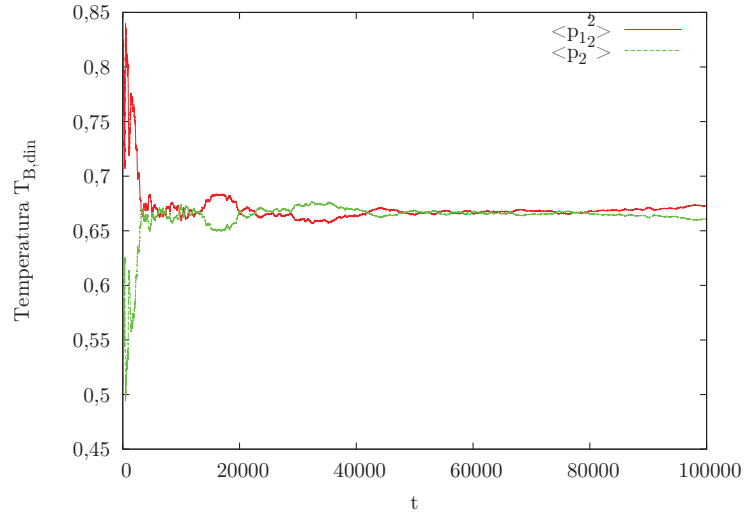


Figura 3.2: Resultados do cálculo dinâmico da temperatura de acordo com a definição de Berdichevsky.

A Fig. 3.2 mostra os resultados do cálculo das temperaturas dinâmicas $T_{B,din}^{(1)}$ e $T_{B,din}^{(2)}$ do oscilador quártico no caso em que $E = 1$. Lembramos que o valor atribuído ao parâmetro α para a realização das simulações necessárias é $\alpha = 0,99$. Para o intervalo de tempo considerado, as temperaturas dinâmicas $T_{B,din}^{(1)}$ e $T_{B,din}^{(2)}$ convergem para 0,672 e 0,661, respectivamente. Isso significa que a fórmula de Berdichevsky

para a temperatura, Eq. (3.29), prevê corretamente o resultado das simulações — a menos de um erro percentual inferior a 0,9% nos dois cálculos realizados.

3.4 Termalização em Teorias de *Gauge*

Agora que a aplicabilidade das ideias desenvolvidas pelos autores mencionados acima está estabelecida através de análises teóricas e computacionais para o caso do oscilador quártico, gostaríamos de aplicá-las ao estudo de sistemas para os quais uma descrição estatística é mais do que mera curiosidade teórica. Portanto, surge a seguinte questão: existem SDHs com poucos graus de liberdade cuja descrição estatística é interessante por razões físicas?

Uma classe de sistemas físicos para os quais a MEC de SDHs autônomos e ergódicos com poucos graus de liberdade é aplicável e pode fornecer informações qualitativas a respeito das teorias que os descrevem vem da teoria clássica de campos. Mais precisamente, existem alguns sistemas vindos das teorias clássicas de *gauge* (as teorias são clássicas no sentido de que não foram submetidas a um procedimento de quantização) que parecem fornecer uma resposta afirmativa para o nosso último questionamento. Esse é o tema do presente trabalho: aplicações da MEC de Berdichevsky a SDHs caóticos com um espaço de fase de baixa dimensionalidade e que surgem da consideração de sistemas representativos em teorias clássicas de *gauge*.

No entanto, antes de apresentar o modelo que estudaremos e os nossos resultados, precisamos introduzir as teorias de *gauge*. Esse é o assunto do próximo capítulo.

Capítulo 4

Caos em Teorias Clássicas de *Gauge*

4.1 Lei de Conservação do *Isospin*

O conceito de conservação do *spin* isotópico é uma das bases da teoria fundamental das interações fortes, a QCD. A noção de *spin* isotópico ou *isospin* foi discutida pela primeira vez em 1932, por Werner Heisenberg [23]. Ele utilizou essa ideia para descrever os dois estados de carga de um núcleon, isto é, o nêutron e o próton.

Esses estados deveriam ser iguais a menos de um certo número quântico, ao qual foi associada uma nova grandeza, o *spin* isotópico. Esse nome vem de uma analogia com o *spin*, no sentido de que nêutrons e prótons passavam a ser vistos como estados de *isospin up* e *down*. O núcleon é, portanto, uma partícula de *spin* isotópico $\frac{1}{2}$.

A possibilidade de o nêutron e o próton corresponderem a estados distintos de uma mesma partícula foi considerada naquela época, em primeiro lugar, devido ao fato de que as suas massas de repouso têm valores muito próximos. A massa de repouso do nêutron é aproximadamente $939,6 \text{ MeV}/c^2$, enquanto que no caso do próton o valor correspondente é $938,3 \text{ MeV}/c^2$. Outra indicação de que essa descrição era aceitável vinha do fato de que os núcleos leves, pares e estáveis possuem a mesma quantidade de nêutrons e prótons.

Em 1937, Breit, Condon e Present analisaram dados provenientes de experimentos de espalhamento próton-próton [24]. O resultado dessa análise foi a conclusão de que existe uma igualdade aproximada entre as intensidades das interações nêutron-próton e próton-próton. Nas palavras de B. Cassen e E. Condon [25]: “A suposição mais simples para a lei de interação [entre núcleons] é aquela que implica a igualdade entre as forças de interação próton-próton e próton-nêutron . . . em concordância com o conhecimento empírico dessas interações no presente momento.”

Grosso modo, portanto, nêutrons e prótons experimentam o mesmo tipo de força no contexto das interações fortes.

Com tantas indicações de que o nêutron e o próton corresponderiam a estados diferentes da mesma partícula, diferindo apenas por um número quântico de *isospin*, chegava-se ao conceito de um *spin* isotópico total, que é conservado em interações núcleon-núcleon. Sabemos, do teorema de Noether [26], que leis de conservação estão diretamente relacionadas com invariâncias da ação de um sistema físico. A lei de conservação do *spin* isotópico corresponde à invariância de todas as interações sob rotações de *isospin*. Em termos físicos, isso equivale a dizer que a diferenciação entre um nêutron e um próton é um processo arbitrário; se todos os nêutrons de um sistema fossem trocados por prótons e vice-versa, as interações entre os constituintes desse sistema permaneceriam as mesmas. Experimentos relacionados aos níveis de energia de núcleos leves foram uns dos primeiros a sugerir que essa suposição estava mesmo correta [27].

Yang e Mills [28] implementaram essa ideia matematicamente argumentando que o núcleon deveria ser descrito por um dubleto de *isospin*, da mesma forma que o elétron na Mecânica Quântica Não-Relativística [29] é descrito por um dubleto de *spin*, ou seja, uma função de onda com 2 componentes, uma associada ao *spin up* e a outra ao *spin down*. A contribuição de Yang e Mills foi ter construído uma densidade de Lagrangiana com a propriedade desejada de invariância para descrever o comportamento dessas funções de onda com uma estrutura interna.

Curiosamente, no entanto, a teoria de YM na sua forma original se mostrou de pouca utilidade. Como demonstraremos, a construção dessa teoria exige a introdução de 3 partículas vetoriais (isto é, de *spin* 1) com massas de repouso nulas. Sendo assim, para a teoria ser bem sucedida, era necessário identificar os candidatos para essas partículas. No contexto das interações fortes, os únicos candidatos eram os mésons ρ , mas as suas massas de repouso estão longe de ser nulas ($M_\rho = 770 \text{ MeV}/c^2$).

A importância da teoria de YM vem do fato de que esta representa o exemplo mais simples de uma classe de teorias físicas conhecidas como *teorias de gauge não-Abelianas*. Quando estas finalmente encontraram aplicação na descrição da Natureza, foi em conexão com a simetria de cor das interações fortes e na teoria de Weinberg-Salam das interações eletrofracas [26].

4.2 Teorias de *Gauge*

A descoberta das teorias de *gauge* representa um dos grandes avanços da Física contemporânea. Atualmente, existe o paradigma de que as teorias que descrevem as quatro interações fundamentais da Natureza, a saber: a interação gravitacional, a eletromagnética e as interações fraca e forte, podem ser formuladas através de um princípio de invariância sob transformações locais pertencentes a um determinado grupo (no sentido matemático preciso).

O objetivo da presente seção é transpor para uma linguagem matemática as ideias sobre *isospin* apresentadas na seção anterior. Essa discussão vai culminar na teoria de YM. Mostraremos que esta pode ser obtida através da utilização de um *princípio de gauge*, que adotaremos como um “novo” princípio fundamental da Física. No entanto, antes de discutir a teoria de YM, achamos esclarecedor introduzir o princípio de *gauge* numa situação mais simples, a da Eletrodinâmica, que, como veremos, é uma teoria de *gauge* U(1).

4.2.1 Eletrodinâmica

Acoplamento Mínimo

Considere o problema de descrever uma partícula eletricamente carregada a interagir com o campo eletromagnético. Este foi formulado pela primeira vez da seguinte maneira [30]: as variações temporais e espaciais dos campos elétrico $\mathbf{E}$ e magnético $\mathbf{B}$ são determinadas pelas equações de Maxwell, que em unidades de Heaviside-Lorentz são dadas por

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho \quad (4.1a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (4.1b)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (4.1c)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \mathbf{J} \quad (4.1d)$$

onde ρ , $\mathbf{J}$ são as densidades de carga e de corrente associadas à partícula, respectivamente. Além disso, a dinâmica desta é determinada pela lei de força de Lorentz

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (4.2)$$

onde q , $\mathbf{v}$ e $\mathbf{p}$ são a carga elétrica, a velocidade e o *momentum* da partícula, respectivamente.

Posteriormente, percebeu-se que a formulação desse problema apresentada acima pode ser obtida através de uma prescrição que ficou conhecida como *acoplamento mínimo*. Mais precisamente, mostrou-se que a Hamiltoniana H que descreve o sistema sob consideração, dada por

$$H = H_{EM} + H_p + H_{int} \quad (4.3)$$

onde H_{EM} denota a Hamiltoniana do campo eletromagnético livre, H_p denota a Hamiltoniana da partícula livre e H_{int} representa a Hamiltoniana de interação, pode ser obtida através do seguinte esquema:

1. Escreva a Hamiltoniana H_p que descreve a partícula livre.
2. Nessa expressão, troque o *momentum* $\mathbf{p}$ canonicamente conjugado à posição da partícula da seguinte maneira¹:

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - q\mathbf{A} \quad (4.4)$$

onde $\mathbf{A}$ denota o potencial vetor do campo eletromagnético. A expressão obtida através dessa troca corresponde à soma $H_p + H_{int}$. É aqui, portanto, que a interação é introduzida.

3. Some à expressão do passo 2 a Hamiltoniana H_{EM} , que descreve o campo eletromagnético livre.

Para ver uma demonstração de que o esquema apresentado acima fornece realmente a Hamiltoniana H , o leitor pode consultar a Ref. [30].

Eletrodinâmica Espinorial

Agora queremos mostrar como a prescrição do acoplamento mínimo é implementada numa teoria de campos relativística, onde as partículas não são vistas como sendo puntiformes e, sim, como campos. Mais precisamente, vamos fazer uso das ideias desenvolvidas acima para derivar a Lagrangiana que descreve um férmion de *spin* $\frac{1}{2}$ eletricamente carregado a interagir com o campo eletromagnético. O nosso

¹Sem perda de generalidade, estamos trabalhando no *gauge* de Coulomb. Este é definido pela condição $\varphi = 0$, onde φ denota o potencial escalar.

ponto de partida é a Lagrangiana que descreve o campo fermiônico livre, ou seja, a Lagrangiana de Dirac:

$$\mathcal{L}_D = \bar{\psi}(\imath\gamma^\mu\partial_\mu - m)\psi \quad (4.5)$$

onde ψ denota o campo espinorial de Dirac com 4 componentes, γ^μ são as matrizes de Dirac, $\bar{\psi} = \psi^\dagger\gamma^0$ é o adjunto de ψ e m é a massa de repouso da partícula. Note que nessa expressão não há qualquer referência ao fato de que a partícula possui carga elétrica não-nula.

É bastante simples verificar que a Lagrangiana (4.5) é invariante sob a transformação

$$\psi(x) \rightarrow \psi'(x) = \exp(-\imath q\alpha)\psi(x) \quad (4.6a)$$

$$\bar{\psi}(x) \rightarrow \bar{\psi}'(x) = \bar{\psi}(x) \exp(\imath q\alpha) \quad (4.6b)$$

onde q é, nesse ponto, apenas um parâmetro real e α é uma constante real arbitrária. Diz-se que $\mathcal{L}_D$ é invariante sob uma transformação de *gauge* global, onde a palavra “global” reflete o fato de que o parâmetro α que caracteriza a transformação é uma constante.

Agora introduzimos o chamado princípio de *gauge*. Em outras palavras, exigimos que a teoria sob consideração também seja invariante sob a transformação (4.6) no caso em que o parâmetro α é uma função das coordenadas do espaço-tempo. É simples verificar que a Lagrangiana $\mathcal{L}_D$ não é invariante sob a transformação

$$\psi(x) \rightarrow \psi'(x) = \exp[-\imath q\alpha(x)]\psi(x) \quad (4.7a)$$

$$\bar{\psi}(x) \rightarrow \bar{\psi}'(x) = \bar{\psi}(x) \exp[\imath q\alpha(x)] \quad (4.7b)$$

onde x denota o ponto do espaço-tempo onde os campos estão sendo avaliados. Isso reflete o fato de que a lei de transformação da derivada $\partial_\mu\psi$ não possui a mesma forma daquela para ψ . Uma maneira de tornar a teoria invariante sob transformações do tipo (4.7) é trocar a derivada $\partial_\mu\psi$ na Lagrangiana (4.5) por uma *derivada covariante de gauge* $\nabla_\mu\psi$, que sob a transformação (4.7) se transforma de acordo com

$$\nabla_\mu\psi(x) \rightarrow \nabla'_\mu\psi'(x) = \exp[-\imath q\alpha(x)]\nabla_\mu\psi(x) \quad (4.8)$$

ou seja, da mesma maneira que o campo ψ .

A questão que precisamos responder agora é: como construir a derivada covariante de *gauge* ∇_μ ? Para obter a expressão desejada, somos obrigados a introduzir um campo vetorial A^μ que, quando ψ se transforma de acordo com a Eq. (4.7), tem a seguinte lei de transformação:

$$A_\mu(x) \rightarrow A'_\mu(x) = A_\mu(x) - \partial_\mu \alpha(x) \quad (4.9)$$

Tendo introduzido esse campo vetorial, a forma explícita de ∇_μ é dada por

$$\nabla_\mu = \partial_\mu - iqA_\mu \quad (4.10)$$

Submetendo o campo espinorial ψ à transformação (4.7), o campo vetorial A_μ à transformação (4.9) e usando a forma explícita da derivada ∇_μ , Eq. (4.10), é direto verificar que a Eq. (4.8) é válida.

Vamos resumir o procedimento que acabamos de descrever. Partimos da Lagrangiana $\mathcal{L}_D$, Eq. (4.5), que descreve um campo de *spin* $\frac{1}{2}$. Isso corresponde ao passo 1 descrito anteriormente. Essa Lagrangiana possui a propriedade de invariância sob transformações de *gauge* globais, Eq. (4.6). Propusemos estender a invariância em questão para o caso em que $\alpha = \alpha(x)$. Então a teoria que passamos a considerar é aquela que pode ser derivada da Lagrangiana $\mathcal{L}'_D$ dada por

$$\mathcal{L}'_D = \bar{\psi}(\not{\partial} - m)\psi \quad (4.11)$$

Essa Lagrangiana é invariante sob a transformação combinada

$$\psi(x) \rightarrow \psi'(x) = \exp[-iq\alpha(x)]\psi(x) \quad (4.12a)$$

$$\bar{\psi}(x) \rightarrow \bar{\psi}'(x) = \bar{\psi}(x) \exp[iq\alpha(x)] \quad (4.12b)$$

$$A_\mu(x) \rightarrow A'_\mu(x) = A_\mu(x) - \partial_\mu \alpha(x) \quad (4.12c)$$

que chamaremos de uma transformação de *gauge* local, onde a palavra “local” reflete o fato de que o parâmetro α não é mais uma constante e, sim, uma função das coordenadas do espaço-tempo. Nessa linguagem, adotar o princípio de *gauge* significa exigir que a teoria sob consideração seja invariante sob transformações de *gauge* locais.

Como discutido na Ref. [31], a imposição da invariância sob transformações de *gauge*

loais é a maneira de implementar no formalismo Lagrangiano da teoria de campos o equivalente do passo 2 do formalismo Hamiltoniano apresentado acima. Para que isso seja verdade, será necessário identificar o parâmetro q da transformação de *gauge* local, Eq. (4.7), com a carga elétrica da partícula descrita pelo campo de *spin* $\frac{1}{2}$. Além disso, o campo vetorial A_μ introduzido juntamente com a derivada covariante de *gauge* ∇_μ , Eq. (4.10), terá de ser identificado com o campo eletromagnético. Note, portanto, como a exigência de que a Lagrangiana $\mathcal{L}_D$, Eq. (4.5), seja invariante sob a transformação (4.7) levou à introdução de uma “carga” através da qual a partícula interage com um certo campo vetorial. Essa é a implicação física do princípio de *gauge*.

Dessa maneira, precisamos agora implementar o equivalente do passo 3, ou seja, precisamos somar à Lagrangiana da Eq. (4.11) o termo que descreve o comportamento do campo eletromagnético na ausência de fontes. Essa situação corresponde a tomar $\rho = 0$ e $\mathbf{J} = 0$ nas equações de Maxwell (4.1):

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0 \quad (4.13a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (4.13b)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (4.13c)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (4.13d)$$

Sabemos que, na ausência ou não de fontes do campo eletromagnético, os campos elétrico $\mathbf{E}$ e magnético $\mathbf{B}$ admitem uma descrição em termos de potenciais eletromagnéticos. Isso significa que existem funções φ e $\mathbf{A}$ tais que

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (4.14a)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (4.14b)$$

Identificando os potenciais φ e $\mathbf{A}$ com as componentes de A^μ , isto é, usando que $A^\mu = (\varphi, \mathbf{A})$, é possível provar que as equações de Maxwell no espaço livre dadas acima podem ser derivadas da seguinte densidade de Lagrangiana [30]:

$$\mathcal{L}_{EM} = -\frac{1}{4}F^{\mu\nu}F_{\mu\nu} \quad (4.15)$$

onde o chamado tensor do campo eletromagnético tem as suas componentes covariantes dadas por

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu \quad (4.16)$$

Uma verificação direta dessa afirmação consiste em escrever as equações de Euler-Lagrange [26] para $\mathcal{L}_{EM}$, derivar as equações de campo correspondentes e usar as relações (4.14) para provar que aquelas são equivalentes a (4.13).

Perceba que o tensor de campo $F_{\mu\nu}$ é invariante sob a transformação

$$A_\mu(x) \rightarrow A'_\mu(x) = A_\mu(x) - \partial_\mu \alpha(x) \quad (4.17)$$

de tal forma que $\mathcal{L}_{EM}$ também é invariante sob uma tal transformação. Em termos dos campos $\mathbf{E}$ e $\mathbf{B}$, essa invariância reflete o fato bastante conhecido em Eletrodinâmica Clássica de que existe uma ambiguidade na descrição dos campos elétrico e magnético em termos de φ e $\mathbf{A}$, pois a transformação dos potenciais eletromagnéticos

$$\varphi \rightarrow \varphi' = \varphi - \frac{\partial \alpha}{\partial t} \quad (4.18a)$$

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla \alpha \quad (4.18b)$$

não tem qualquer efeito sobre $\mathbf{E}$ e $\mathbf{B}$.

Finalmente, somando a Lagrangiana $\mathcal{L}_{EM}$, que descreve o campo eletromagnético livre, à Lagrangiana $\mathcal{L}'_D$, que descreve uma partícula com massa de repouso m , carga elétrica q e *spin* $\frac{1}{2}$ a interagir com o campo eletromagnético, obtemos a Lagrangiana $\mathcal{L}$ da teoria completa:

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} + \bar{\psi} (i\gamma^\mu \nabla_\mu - m) \psi \quad (4.19)$$

A Lagrangiana $\mathcal{L}$ é invariante sob a transformação de *gauge* local da Eq. (4.12).

Terminologia da Teoria de Grupos

Uma vez que o campo de Dirac se transforma de acordo com

$$\psi(x) \rightarrow \psi'(x) = \exp[-iq\alpha(x)]\psi(x) \quad (4.20)$$

e o conjunto das transformações de fase locais $\exp[-iq\alpha(x)]$ forma um grupo (com a operação de grupo sendo a multiplicação), chamado de $U(1)$, as transformações (4.12) são ditas transformações de *gauge* $U(1)$. Notando que, para duas funções reais arbitrárias α_1 e α_2 das coordenadas do espaço-tempo, vale a relação

$$\exp[-iq\alpha_1(x)] \exp[-iq\alpha_2(x)] = \exp[-iq\alpha_2(x)] \exp[-iq\alpha_1(x)] \quad (4.21)$$

chegamos à conclusão de que o grupo $U(1)$ é *comutativo* ou *Abeliano*. Fazendo uso dessa terminologia, é usual dizer que a Eletrodinâmica é uma teoria de *gauge* Abelian. Neste ponto, a introdução dessa terminologia pode parecer uma sofisticação desnecessária. No entanto, como veremos na sequência, é através da consideração de grupos de transformações com uma estrutura de grupo mais complexa do que a de $U(1)$ que podemos construir a Lagrangiana da teoria de YM e a Lagrangiana da QCD.

O grupo de transformações ou grupo de *gauge* associado à teoria de YM é o $SU(2)$, o grupo das matrizes unitárias 2×2 com determinante igual a $+1$ (a operação de grupo sendo a multiplicação de matrizes); a QCD tem como grupo de *gauge* o grupo $SU(3)$, definido de maneira análoga ao grupo $SU(2)$. Podemos ver que $SU(2)$ e $SU(3)$ têm, de fato, uma estrutura de grupo mais complexa do que a de $U(1)$ notando, por exemplo, que aqueles são grupos *não-comutativos* ou *não-Abelianos*. A teoria de YM e a QCD são, portanto, exemplos das chamadas teorias de *gauge* não-Abelianas. Grosso modo, esse é um reflexo da não-comutatividade da operação de multiplicação de matrizes. Consideremos agora a construção da Lagrangiana da teoria de YM.

4.2.2 Teorias de *Gauge* Não-Abelianas

Teoria de Yang-Mills

Depois de ter provado que a Lagrangiana da Eletrodinâmica pode ser obtida através da imposição de um princípio de invariância sob transformações de *gauge* locais, estamos prontos para transpor para uma linguagem matemática as ideias sobre *isospin* apresentadas na Seção 4.1.

Da mesma maneira que no caso da Eletrodinâmica, onde partimos da Lagrangiana livre de um campo de *spin* $\frac{1}{2}$ para obter a descrição de um férmion carregado a interagir com o campo eletromagnético, partimos aqui da Lagrangiana das partícu-

las livres que carregarão *isospin*, o nêutron e o próton. Essas partículas são férmions de *spin* $\frac{1}{2}$, de maneira que a Lagrangiana que as descreve numa situação onde não há interação é dada por

$$\mathcal{L} = \bar{\psi}_1(\not{\partial} - m_1)\psi_1 + \bar{\psi}_2(\not{\partial} - m_2)\psi_2 \quad (4.22)$$

onde ψ_1 e ψ_2 denotam, por exemplo, o campo do nêutron e o do próton. Da mesma forma, m_1 e m_2 representam as massas de repouso das partículas correspondentes. De acordo com o que foi discutido na Seção 4.1, encaramos o nêutron e o próton como estados distintos de uma mesma partícula; com isso em mente, introduzimos a notação

$$\Psi \equiv \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix} \quad (4.23)$$

isto é, organizamos os campos ψ_1 e ψ_2 num vetor coluna com duas componentes. O campo Ψ pode, portanto, ser visto como o campo do núcleon. Usando a definição acima, podemos reescrever a Lagrangiana (4.22) da seguinte maneira:

$$\mathcal{L} = \bar{\Psi}(\not{\partial} - M)\Psi \quad (4.24)$$

onde o adjunto $\bar{\Psi}$ é dado por

$$\bar{\Psi} = \begin{bmatrix} \bar{\psi}_1 & \bar{\psi}_2 \end{bmatrix} \quad (4.25)$$

e M denota a chamada *matriz de massa*:

$$M = \begin{bmatrix} m_1 & 0 \\ 0 & m_2 \end{bmatrix} \quad (4.26)$$

Utilizando agora o fato experimental de que a massa de repouso do nêutron é aproximadamente igual à do próton, ou seja, que $m_1 \approx m_2 \equiv m$, a Lagrangiana (4.24) pode ser posta na forma

$$\mathcal{L} \approx \bar{\Psi}(\not{\partial} - m)\Psi \quad (4.27)$$

A Lagrangiana acima possui a mesma forma da Lagrangiana de Dirac de 1 partícula. No entanto, Ψ é um vetor coluna com duas componentes, de maneira que podemos submeter esse campo a transformações mais complexas do que a simples multiplicação por um fator de fase, como era feito no caso da Eletrodinâmica. Por exemplo,

considere a transformação global

$$\Psi(x) \rightarrow \Psi'(x) = S\Psi(x) \quad (4.28a)$$

$$\bar{\Psi}(x) \rightarrow \bar{\Psi}'(x) = \bar{\Psi}(x)S^\dagger \quad (4.28b)$$

onde S é uma matriz unitária 2×2 arbitrária. É bastante conhecido o fato de que essas matrizes formam um grupo, o chamado grupo $U(2)$. Pode-se mostrar que a matriz S sempre pode ser escrita na forma

$$S = \exp(iH) \quad (4.29)$$

onde H é uma certa matriz 2×2 Hermitiana ($H = H^\dagger$). Sendo assim, o elemento mais geral de $U(2)$ corresponde à matriz H com a forma mais geral. A matriz Hermitiana 2×2 mais geral tem a forma

$$H = \begin{bmatrix} \zeta_1 & \zeta_2 \\ \zeta_2^* & \zeta_3 \end{bmatrix} \quad (4.30)$$

onde ζ_1 e ζ_3 são números reais e ζ_2 é, em geral, um número complexo. Reescreva as entradas dessa matriz da seguinte maneira:

$$\zeta_1 = \theta + a_3 \quad (4.31a)$$

$$\zeta_2 = a_1 - ia_2 \quad (4.31b)$$

$$\zeta_3 = \theta - a_3 \quad (4.31c)$$

onde $\theta, a_k \in \mathbb{R}$ ($k = 1, 2, 3$). Fazendo isso, prova-se que a matriz H pode ser escrita como

$$H = \theta I + a_1\sigma_1 + a_2\sigma_2 + a_3\sigma_3 \equiv \theta I + \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (4.32)$$

onde I denota a matriz identidade 2×2 e σ_k ($k = 1, 2, 3$) são as matrizes de Pauli

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.33a)$$

$$\sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad (4.33b)$$

$$\sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (4.33c)$$

Substituindo a Eq. (4.32) na Eq. (4.29), vemos que um elemento arbitrário do grupo $U(2)$ pode ser expresso como

$$S = \exp(i\theta) \exp(i\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \quad (4.34)$$

Levando em consideração que, grosso modo, o efeito do fator $\exp(i\theta)$ é introduzir as interações eletromagnéticas e que a teoria de YM foi concebida como uma tentativa de descrever as interações fortes, restringimos a discussão a elementos do $U(2)$ com a forma

$$S = \exp(i\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \quad (4.35)$$

Pode-se mostrar que as matrizes unitárias 2×2 com essa forma têm determinante igual a $+1$. As matrizes com a forma dada na equação acima formam o grupo conhecido como $SU(2)$.

Dessa maneira, estaremos considerando transformações do tipo

$$\Psi(x) \rightarrow \Psi'(x) = S\Psi(x) \quad (4.36a)$$

$$\bar{\Psi}(x) \rightarrow \bar{\Psi}'(x) = \bar{\Psi}(x)S^\dagger \quad (4.36b)$$

com

$$S = \exp(ig\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\tau}) \in SU(2) \quad (4.37)$$

onde g é a chamada de constante de acoplamento de *gauge* e utilizamos as seguintes definições:

$$\mathbf{a} \equiv \frac{g}{2}\mathbf{b} \quad (4.38)$$

e

$$\boldsymbol{\tau} \equiv \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \quad (4.39)$$

Estamos considerando as transformações globais, ou seja, aquelas para as quais $\mathbf{b}$ é um vetor constante. É direto verificar que a Lagrangiana (4.27) é invariante sob tais transformações. Agora, a exemplo do que foi feito quando discutimos a Eletrodinâmica, a proposta é exigir que essa invariância persista quando considerarmos transformações locais, isto é, aquelas para as quais $\mathbf{b}$ é uma função das coordenadas do espaço-tempo. Explicitamente, considere transformações do tipo

$$\Psi(x) \rightarrow \Psi'(x) = S(x)\Psi(x) = \exp[ig\mathbf{b}(x) \cdot \boldsymbol{\tau}]\Psi(x) \quad (4.40a)$$

$$\bar{\Psi}(x) \rightarrow \bar{\Psi}'(x) = \bar{\Psi}(x)S^\dagger(x) = \bar{\Psi}(x) \exp[-ig\mathbf{b}(x) \cdot \boldsymbol{\tau}] \quad (4.40b)$$

De maneira análoga ao caso eletromagnético, a Lagrangiana (4.27) tal como está não é invariante sob a transformação local acima. De fato, sob (4.40) a Lagrangiana se transforma de acordo com

$$\mathcal{L} \rightarrow \mathcal{L}' = \mathcal{L} + i\bar{\Psi}S^\dagger\gamma^\mu(\partial_\mu S)\Psi \quad (4.41)$$

Como na Eletrodinâmica, esse resultado é uma consequência do fato de que sob (4.40) a derivada $\partial_\mu\Psi$ tem uma lei de transformação com uma forma diferente daquela para o campo Ψ .

Contornamos a dificuldade acima da mesma maneira que fizemos no caso da Eletrodinâmica, ou seja, introduzindo uma derivada covariante de *gauge* ∇_μ de tal forma que, sob a transformação (4.40), $\nabla_\mu\Psi$ se transforma de acordo com:

$$\nabla_\mu\Psi(x) \rightarrow \nabla'_\mu\Psi'(x) = S(x)\nabla_\mu\Psi(x) \quad (4.42)$$

Em posse de uma forma explícita para ∇_μ , podemos obter uma Lagrangiana invariante sob transformações de *gauge* SU(2) locais a partir da Eq. (4.27), fazendo a substituição $\partial_\mu \rightarrow \nabla_\mu$:

$$\mathcal{L} = \bar{\Psi}(i\gamma^\mu\nabla_\mu - m)\Psi \quad (4.43)$$

A expressão para a derivada covariante de *gauge* também pode ser construída com base no que tínhamos na Eletrodinâmica. No entanto, devido à maior complexidade matemática de $S = \exp[ig\mathbf{b}(x) \cdot \boldsymbol{\tau}]$ em comparação com as transformações de fase locais $\exp[-iq\alpha(x)]$ da Eletrodinâmica, ao invés de introduzir apenas um campo vetorial A_μ , devemos considerar três novos campos vetoriais A_μ^1 , A_μ^2 e A_μ^3 . Em termos de $\mathbf{A}_\mu = (A_\mu^1, A_\mu^2, A_\mu^3)$, a derivada ∇_μ é dada por

$$\nabla_\mu = \partial_\mu - ig\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{A}_\mu \quad (4.44)$$

Mas a lei de transformação do campo $\mathbf{A}_\mu$ sob (4.40) não pode ser qualquer, pois queremos que a Eq. (4.42) seja válida. É direto verificar que se tivermos a lei de transformação

$$\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{A}_\mu \rightarrow \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{A}'_\mu = S(\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{A}_\mu)S^{-1} + \frac{1}{ig}(\partial_\mu S)S^{-1} \quad (4.45)$$

então a Eq. (4.42) se verifica.

A Lagrangiana da teoria completa pode ser obtida a partir de (4.43) através da inclusão de um termo que corresponde à Lagrangiana livre do campo $\mathbf{A}_\mu$. Denotando essa Lagrangiana por $\mathcal{L}_\mathbf{A}$, propomos uma expressão análoga àquela que descreve o campo eletromagnético livre:

$$\mathcal{L}_\mathbf{A} = -\frac{1}{4}F^{1\mu\nu}F_{\mu\nu}^1 - \frac{1}{4}F^{2\mu\nu}F_{\mu\nu}^2 - \frac{1}{4}F^{3\mu\nu}F_{\mu\nu}^3 \equiv -\frac{1}{4}\mathbf{F}^{\mu\nu} \cdot \mathbf{F}_{\mu\nu} \quad (4.46)$$

ou seja, cada um dos campos vetoriais A_μ^a que introduzimos é descrito por uma densidade de Lagrangiana $\mathcal{L}_a$ com a forma

$$\mathcal{L}_a = -\frac{1}{4}F^{a\mu\nu}F_{\mu\nu}^a \quad (4.47)$$

(sem soma sobre o índice a), que descreve um campo vetorial sem massa. Observe que esse é o caso na Eletrodinâmica, pois os fótons (*quanta* do campo eletromagnético) viajam com a velocidade c da luz. Justificamos o fato de que os campos considerados são não-massivos observando que a inclusão de um termo de Proca na Lagrangiana $\mathcal{L}_a$ resultaria na adição de um termo proporcional a $\mathbf{A}^\mu \cdot \mathbf{A}_\mu$ à Eq. (4.46), o que comprometeria a invariância de *gauge* da teoria que estamos tentando construir. Para verificar esse resultado, considere o caso mais simples das transformações de *gauge* infinitesimais. Se $|\mathbf{b}| \ll 1$, então podemos escrever

$$S \approx 1 + \imath g \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\tau} \quad (4.48a)$$

$$S^{-1} \approx 1 - \imath g \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\tau} \quad (4.48b)$$

$$\partial_\mu S \approx \imath g (\partial_\mu \mathbf{b}) \cdot \boldsymbol{\tau} \quad (4.48c)$$

Dessa maneira, substituindo as expressões (4.48) na lei de transformação (4.45), chega-se a

$$\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{A}'_\mu \approx \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{A}_\mu + \boldsymbol{\tau} \cdot \partial_\mu \mathbf{b} + \imath g [\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\tau}, \mathbf{A}_\mu \cdot \boldsymbol{\tau}] \quad (4.49)$$

As matrizes de Pauli satisfazem a relação de comutação $[\sigma^a, \sigma^b] = 2\imath f^{abc}\sigma^c$, onde f^{abc} representa as componentes do tensor de Levi-Civita, que também podem ser identificadas com as chamadas constantes de estrutura do grupo SU(2). Usando essa relação e a definição das matrizes $\boldsymbol{\tau}$, prova-se que

$$[\mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\tau}, \mathbf{w} \cdot \boldsymbol{\tau}] = \imath \boldsymbol{\tau} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{w}) \quad (4.50)$$

para quaisquer $\mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbb{R}^3$. Fazendo uso da fórmula acima para calcular o comutador no último termo da expressão para $\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{A}'_\mu$, Eq. (4.49), chegamos à lei de transformação

infinitesimal para $\mathbf{A}_\mu$:

$$\mathbf{A}_\mu \rightarrow \mathbf{A}'_\mu \approx \mathbf{A}_\mu + \partial_\mu \mathbf{b} - g(\mathbf{b} \times \mathbf{A}_\mu) \quad (4.51)$$

Usando a Eq. (4.51), é direto verificar que, sob uma transformação de *gauge* infinitesimal, $\mathbf{A}^\mu \cdot \mathbf{A}_\mu$ se transforma de acordo com

$$\mathbf{A}^\mu \cdot \mathbf{A}_\mu \rightarrow \mathbf{A}'^\mu \cdot \mathbf{A}'_\mu \approx \mathbf{A}^\mu \cdot \mathbf{A}_\mu + 2(\partial_\mu \mathbf{b}) \cdot \mathbf{A}^\mu \quad (4.52)$$

o que mostra claramente o fato de que a inclusão de um termo de massa na Lagrangiana (4.46) destrói a invariância de *gauge* da teoria. Isso prova a afirmação feita na Seção 4.1 de que 3 partículas vetoriais sem massa — os *quanta* dos 3 novos campos vetoriais — precisam ser introduzidas na teoria.

A questão que precisa ser respondida agora é: qual é a forma explícita do tensor de campo de YM $\mathbf{F}_{\mu\nu}$ que devemos usar para ter $\mathcal{L}_\mathbf{A}$ invariante sob transformações de *gauge*? Poderíamos mais uma vez proceder em analogia com o caso da Eletrodinâmica: como o tensor do campo eletromagnético possui a forma $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$, a nossa primeira tentativa para a forma de $\mathbf{F}_{\mu\nu}$ é $\mathbf{F}_{\mu\nu} = \partial_\mu \mathbf{A}_\nu - \partial_\nu \mathbf{A}_\mu$. No entanto, se submetermos o campo de *gauge* $\mathbf{A}_\mu$ à transformação infinitesimal (4.51), depois de um cálculo direto porém tedioso, concluiremos que essa escolha para $\mathbf{F}_{\mu\nu}$ não dá origem a uma Lagrangiana $\mathcal{L}_\mathbf{A}$ invariante sob transformações de *gauge*.

Insistimos, porém, na analogia com a Eletrodinâmica. Usando a expressão para a derivada covariante eletromagnética, Eq. (4.10), prova-se a seguinte relação de comutação

$$[\nabla_\mu, \nabla_\nu] = -iqF_{\mu\nu} \quad (4.53)$$

Agora nos perguntamos qual é a relação correspondente na teoria de YM, ou seja, quando a derivada covariante ∇_μ é dada pela Eq. (4.44). Nesse caso, mostra-se que

$$[\nabla_\mu, \nabla_\nu] = -ig(\partial_\mu \mathbf{A}_\nu - \partial_\nu \mathbf{A}_\mu + g\mathbf{A}_\mu \times \mathbf{A}_\nu) \cdot \boldsymbol{\tau} \quad (4.54)$$

Desse modo, comparando as duas últimas equações, vemos que esta sugere a seguinte forma para $\mathbf{F}_{\mu\nu}$:

$$\mathbf{F}_{\mu\nu} = \partial_\mu \mathbf{A}_\nu - \partial_\nu \mathbf{A}_\mu + g\mathbf{A}_\mu \times \mathbf{A}_\nu \quad (4.55)$$

Essa é a expressão para o tensor de campo de YM que procuramos. Há duas maneiras de verificar que a densidade de Lagrangiana (4.46) com $\mathbf{F}_{\mu\nu}$ dado pela Eq. (4.55) satisfaz a exigência de invariância de *gauge*. Primeiro considere o caso das transformações de *gauge* infinitesimais. É possível provar que, quando o campo de *gauge* $\mathbf{A}_\mu$ se transforma de acordo com (4.51), o tensor de campo (4.55) se transforma da seguinte maneira:

$$\mathbf{F}_{\mu\nu} \rightarrow \mathbf{F}'_{\mu\nu} = \mathbf{F}_{\mu\nu} + g(\mathbf{F}_{\mu\nu} \times \mathbf{b}) \quad (4.56)$$

Claramente $\mathcal{L}_\mathbf{A}$ é invariante sob tal transformação, uma vez que $\mathbf{F}_{\mu\nu} \cdot (\mathbf{F}^{\mu\nu} \times \mathbf{b}) = 0$. Note que nesse caso, ao contrário do que acontece no caso da Eletrodinâmica, o próprio tensor de campo não é, em geral, invariante sob transformações de *gauge*.

A outra maneira de verificar a invariância de *gauge* da Lagrangiana (4.46) consiste em observar que esta pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\mathcal{L}_\mathbf{A} = -\frac{1}{2} \text{Tr}[(\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{F}^{\mu\nu})(\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{F}_{\mu\nu})] \quad (4.57)$$

onde, para derivar a equação acima, fizemos uso da fórmula

$$\text{Tr}(\tau^a \tau^b) = \frac{1}{2} \delta^{ab} \quad (4.58)$$

Além disso, usamos a lei de transformação (4.45) para $\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{A}_\mu$ em conjunto com a definição (4.55) para mostrar que $\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{F}_{\mu\nu}$ se transforma de acordo com

$$\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{F}_{\mu\nu} \rightarrow \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{F}'_{\mu\nu} = S(\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{F}_{\mu\nu})S^{-1} \quad (4.59)$$

Usando a lei de transformação acima e a propriedade cíclica do traço, a invariância de *gauge* de $\mathcal{L}_\mathbf{A}$ para uma transformação de *gauge* SU(2) arbitrária segue imediatamente.

Tendo estabelecido a invariância de *gauge* SU(2) da Lagrangiana $\mathcal{L}_\mathbf{A}$, podemos somar a expressão desta àquela dada na Eq. (4.43), que descreve um par de campos de *spin* $\frac{1}{2}$ a interagir com o campo de *gauge* $\mathbf{A}_\mu$, para obter a Lagrangiana completa $\mathcal{L}$ da teoria de YM:

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4} \mathbf{F}^{\mu\nu} \cdot \mathbf{F}_{\mu\nu} + \bar{\Psi}(\gamma^\mu \nabla_\mu - m)\Psi \quad (4.60)$$

A Lagrangiana da equação acima representa uma generalização da Eletrodinâmica, que é uma teoria de *gauge* Abelianas cujo grupo de *gauge* é o $U(1)$, para teorias de *gauge* não-Abelianas.

QCD

A Lagrangiana da QCD pode ser obtida através de um procedimento inteiramente análogo ao apresentado acima para a teoria de YM. Obviamente, deve ser considerado o fato de que o grupo de *gauge* da QCD é o $SU(3)$. Em primeiro lugar, isso significa que a derivação da Lagrangiana da QCD poderia partir da Lagrangiana $\mathcal{L}_0$ que descreve três campos de *spin* $\frac{1}{2}$ não-interagentes e com massas de repouso iguais. Observamos que, no contexto da QCD, essa igualdade entre as massas não é apenas aproximada como na teoria de YM. Em outras palavras, a simetria de *isospin* é aproximada, enquanto que a simetria $SU(3)$ de cor da QCD é exata. No entanto, deve ser levado em consideração o fato de que, na QCD, os quarks — descritos pelo trio de espinores de Dirac com a mesma massa — possuem seis sabores. Dessa maneira, o ponto de partida da derivação dessa teoria é, na verdade, uma soma de seis termos do tipo da Lagrangiana $\mathcal{L}_0$.

Além disso, a derivação também deve ser adaptada para levar em conta o fato de que o papel desempenhado pelas matrizes de Pauli $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ na hora de expressar os elementos do grupo $SU(2)$ é desempenhado aqui pelas chamadas matrizes de Gell-Mann $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \dots, \lambda_8)$. Isso implica que as transformações $SU(3)$ têm a forma

$$S = \exp \left(ig \mathbf{b} \cdot \frac{\boldsymbol{\lambda}}{2} \right) \quad (4.61)$$

onde g é a constante de acoplamento da QCD, $\mathbf{b} = \mathbf{b}(x) = [b_1(x), \dots, b_8(x)]$ e a derivada covariante de *gauge* da QCD é dada por

$$\nabla_\mu = \partial_\mu - ig \frac{\boldsymbol{\lambda}}{2} \cdot \mathbf{A}_\mu \quad (4.62)$$

onde foi necessário introduzir 8 campos vetoriais $\mathbf{A}_\mu = (A_\mu^1, \dots, A_\mu^8)$, que descrevem os glúons. Levadas em conta as modificações indicadas acima, a Lagrangiana da QCD pode ser obtida através de uma argumentação semelhante àquela utilizada por nós para obter a Lagrangiana da teoria de YM.

A semelhança das derivações indica uma similaridade formal entre a teoria de YM e a QCD. De fato, exploramos essa semelhança, como é comum na literatura, através

do uso da teoria $SU(2)$ para entender aspectos qualitativos da teoria $SU(3)$, evitando assim uma dificuldade puramente técnica associada à maior complexidade da estrutura de grupo de $SU(3)$.

4.3 Caos em Teorias de *Gauge* Não-Abelianas

O objetivo da presente seção é discutir uma nova característica das teorias de *gauge* não-Abelianas em comparação com a Eletrodinâmica: a não-linearidade das equações clássicas de movimento para o campo de *gauge*. Reservamos, no entanto, os detalhes matemáticos para o final da seção, onde desenvolveremos a chamada Mecânica Clássica de YM. Nesse contexto, as consequências dessa não-linearidade são exploradas e mostraremos, utilizando as técnicas apresentadas no Capítulo 2, que a dinâmica não-linear do campo de *gauge* $SU(2)$ pode se revelar caótica, de tal forma que o comportamento deste pode ser ergódico.

Não-linearidade

É um fato bastante conhecido na Eletrodinâmica Clássica o de que as equações de Maxwell, Eq. (4.1), formam um sistema linear de equações diferenciais. De fato, muitas das técnicas matemáticas de resolução de problemas em Eletrodinâmica fazem uso da validade do chamado *princípio de sobreposição* [30], uma consequência direta da linearidade das equações de campo dessa teoria.

Como foi discutido nos parágrafos acima, a teoria de Maxwell no espaço livre (isto é, na ausência de fontes do campo eletromagnético) pode ser obtida da Lagrangiana

$$\mathcal{L}_{EM} = -\frac{1}{4}F^{\mu\nu}F_{\mu\nu} \quad (4.63)$$

onde $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$. Posteriormente, quando consideramos o problema de construir a Lagrangiana que desempenha na teoria de YM um papel análogo ao que $\mathcal{L}_{EM}$ desempenha na Eletrodinâmica, tentamos uma expressão com a forma

$$\mathcal{L}_A = -\frac{1}{4}\mathbf{F}^{\mu\nu} \cdot \mathbf{F}_{\mu\nu} \quad (4.64)$$

onde $\mathbf{F}_{\mu\nu} = \partial_\mu \mathbf{A}_\nu - \partial_\nu \mathbf{A}_\mu$. No entanto, essa expressão foi descartada quando exigimos que a Lagrangiana fosse invariante sob transformações de *gauge* $SU(2)$ locais. Uma maneira de interpretar esse resultado é dizendo que o requisito de invariância de *gauge* exclui a possibilidade de construirmos uma teoria de YM linear aos moldes

da teoria de Maxwell.

Diante da dificuldade descrita acima, nós provamos que a Lagrangiana da teoria de YM pode, sim, ser escrita na forma da Eq. (4.64) se o tensor de campo for dado por

$$\mathbf{F}_{\mu\nu} = \partial_\mu \mathbf{A}_\nu - \partial_\nu \mathbf{A}_\mu + g \mathbf{A}_\mu \times \mathbf{A}_\nu \quad (4.65)$$

Note que, devido à invariância de *gauge*, o termo $g \mathbf{A}_\mu \times \mathbf{A}_\nu$ precisou ser adicionado à expressão que consideramos anteriormente para o tensor $\mathbf{F}_{\mu\nu}$. Como discutiremos mais detalhadamente abaixo, a presença desse termo dá origem a termos não-lineares nas equações de campo da teoria de YM. Como consequência da semelhança formal entre a teoria de *gauge* SU(2) e a SU(3) que já discutimos, o mesmo é verdadeiro para a QCD. Interpretamos esse resultado da seguinte maneira: os glúons são portadores das cargas não-Abelianas da QCD, conhecidas como cargas de cor, podendo interagir entre si. Grosso modo, portanto, os termos não-lineares nas equações de campo da QCD que descrevem os glúons refletem a auto-interação destes. Compare essa situação com aquela existente na Eletrodinâmica, onde os fótons possuem carga elétrica nula e, portanto, não interagem entre si. Isso se reflete na linearidade das equações de Maxwell.

Dinâmica do Campo de Gauge no Vácuo

Na Seção 4.2.2, desenvolvemos a teoria de YM partindo de uma Lagrangiana que descrevia dois campos de *spin* $\frac{1}{2}$ não-interagentes. Como consequência disso, a Lagrangiana que obtivemos no final da nossa construção continha um termo que descrevia o campo de *gauge* SU(2) livre e um termo que descrevia tanto a dinâmica livre dos férmions originais quanto a interação destes com o campo $\mathbf{A}_\mu$.

Daqui em diante, por outro lado, estaremos interessados na dinâmica do sistema físico formado *exclusivamente* pelos campos de YM. Uma justificativa prática para restringir o nosso interesse de tal maneira vem da observação de que o campo $\mathbf{A}_\mu$ é o verdadeiro ingrediente não-linear da teoria de YM. Fisicamente, o nosso procedimento encontra justificativa na observação de que muitos dos aspectos qualitativos da QCD, a teoria que estamos tentando emular usando a teoria de YM, refletem a dinâmica característica dos glúons.

Considere, portanto, a teoria que descreve os campos de YM na ausência de fontes.

Esta pode ser derivada da densidade de Lagrangiana $\mathcal{L}_\mathbf{A}$, Eq. (4.46):

$$\mathcal{L}_\mathbf{A} = -\frac{1}{4}\mathbf{F}^{\mu\nu} \cdot \mathbf{F}_{\mu\nu} = -\frac{1}{4}F^{a\mu\nu}F_{\mu\nu}^a$$

onde, na última igualdade, expressamos a dependência da Lagrangiana no tensor de campo $\mathbf{F}_{\mu\nu}$ em termos das suas componentes $F_{\mu\nu}^a$ ($a = 1, 2, 3$), de tal forma que existe uma soma implícita sobre o índice repetido a na equação acima. Usando a expressão que derivamos na seção anterior para $\mathbf{F}_{\mu\nu}$, Eq. (4.55), e observando que

$$(\mathbf{A}_\mu \times \mathbf{A}_\nu)^a \equiv f^{abc}A_\mu^b A_\nu^c \quad (4.66)$$

é direto concluir que as componentes do tensor de campo são dadas por

$$F_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + gf^{abc}A_\mu^b A_\nu^c \quad (4.67)$$

Lembramos que f^{abc} são as constantes de estrutura do grupo de *gauge*. No caso da teoria de YM, f^{abc} corresponde às componentes do tensor de Levi-Civita. Lembre também que essas constantes foram introduzidas na teoria quando consideramos as relações de comutação entre as matrizes de Pauli.

Queremos mostrar agora que as equações de campo da teoria que estamos considerando são não-lineares nas variáveis de campo A_μ^a . O procedimento para obter as equações de campo da teoria de YM é o procedimento padrão: construímos a ação $S_\mathbf{A}$ do sistema, definida por

$$S_\mathbf{A} \equiv \int d^4x \mathcal{L}_\mathbf{A} \quad (4.68)$$

onde d^4x denota o elemento de volume no espaço de Minkowski e a integração é feita sobre a totalidade dos eventos associados à evolução do sistema; em seguida, fazemos uso do chamado *princípio de ação mínima* [26], que nos diz que a evolução do sistema ocorre de tal forma que a ação é extremizada. Uma maneira de implementar essa ideia matematicamente é impor que a variação $\delta S_\mathbf{A}$ na ação que resulta de pequenas variações δA_μ^a e $\delta(\partial_\nu A_\mu^a)$ nos campos e nas suas derivadas, respectivamente, é tal que, em primeira ordem nas variações, $\delta S_\mathbf{A} = 0$. O resultado do procedimento acima aplicado à Lagrangiana $\mathcal{L}_\mathbf{A} = \mathcal{L}_\mathbf{A}(A_\mu^a, \partial_\nu A_\mu^a)$ são as equações de Euler-Lagrange

$$\frac{\partial \mathcal{L}_\mathbf{A}}{\partial A_\mu^a} - \partial_\nu \frac{\partial \mathcal{L}_\mathbf{A}}{\partial (\partial_\nu A_\mu^a)} = 0 \quad (4.69)$$

Usando a Eq. (4.67) para $F_{\mu\nu}^a$, podemos concluir através de um cálculo direto que

$$\frac{\partial}{\partial A_\lambda^b}(F^{a\mu\nu}F_{\mu\nu}^a) = 4gf^{abc}A_\nu^cF^{a\lambda\nu} \quad (4.70)$$

e que

$$\frac{\partial}{\partial(\partial_\alpha A_\lambda^b)}(F^{a\mu\nu}F_{\mu\nu}^a) = 4\delta^{ab}F^{a\alpha\lambda} \quad (4.71)$$

Fazendo uso dos dois últimos resultados para calcular as derivadas de $\mathcal{L}_A$ que aparecem nas equações de Euler-Lagrange, obtemos que as equações de campo da teoria são dadas por

$$(\delta^{ac}\partial_\nu + gf^{abc}A_\nu^b)F^{c\mu\nu} = 0 \quad (4.72)$$

É possível ver que estas são não-lineares analisando, por exemplo, o segundo termo no lado esquerdo da equação acima. A expressão para as componentes do tensor de campo, Eq. (4.67), mostra que esse termo da Eq. (4.72) possui termos proporcionais a $A_\nu^b A^{d\mu} A^{e\nu}$, evidenciando a não-linearidade dessa equação. Enfatizamos que um resultado análogo é válido para campos de *gauge* SU(3).

Mecânica Clássica de Yang-Mills

Tendo derivado as equações de campo da teoria de YM, podemos introduzir a teoria conhecida como Mecânica Clássica de YM. Para isso, primeiro utilizamos uma condição de fixação de *gauge*. Escolhemos trabalhar no *gauge de Weyl*, definido por

$$A_0^a = 0, \quad \forall a \quad (4.73)$$

Neste ponto, ao fixar o *gauge*, apenas nos livramos dos graus de liberdade espúrios da teoria de YM. Em outras palavras, nenhuma hipótese física foi feita. A suposição que faremos sobre a Física do sistema tem a ver com a dependência espacial do campo de *gauge* SU(2). Especificamente, utilizaremos a hipótese de que o campo de YM é *uniforme*, dependendo apenas do tempo t de acordo com observadores num certo referencial de Minkowski:

$$\partial_k A_i^a = 0, \quad i, k = 1, 2, 3 \quad (4.74)$$

Como discutido na Ref. [32], um campo de YM uniforme é uma boa aproximação quando a densidade do número de *quanta* de campo é alta. Sendo assim, a simplificação que faremos é justificada pelo fato de que o QGP — sistema com alta densidade de glúons — é um exemplo de sistema físico relevante que pode ser estu-

dado com essa aproximação.

Portanto, daqui em diante estaremos interessados em situações consistentes com o *gauge* de Weyl e com a suposição de campo uniforme. O caso particular da teoria de YM que acabamos de definir através das Eqs. (4.73) e (4.74) recebe o nome de *Mecânica Clássica de YM*.

Queremos agora explorar essa teoria computacionalmente. Então considere a parte temporal (isto é, a componente $\mu = 0$) da Eq. (4.72); é direto verificar que, com as hipóteses introduzidas nos parágrafos acima, ela é dada por

$$A_i^b \dot{A}_i^c - A_i^c \dot{A}_i^b = 0 \quad (4.75)$$

A equação acima é a chamada *lei de Gauss*. Ela recebe esse nome, pois é equivalente à equação que dá a divergência (em termos da derivada covariante de *gauge*) do campo cromoeletrico [26]. Em outras palavras, a Eq. (4.75) desempenha no presente contexto um papel análogo ao da lei de Gauss da Eletrodinâmica, Eq. (4.1a).

As equações que estudaremos numericamente correspondem à parte espacial (isto é, às componentes $\mu = i$, onde $i = 1, 2, 3$) da Eq. (4.72). É direto verificar que elas são dadas por

$$\ddot{A}_i^a + g^2 A_j^b A_j^b \dot{A}_i^a - g^2 A_j^a A_j^b \dot{A}_i^b = 0 \quad (4.76)$$

Afirmamos que as equações acima são aquelas que resolveremos computacionalmente, pois a lei de Gauss, Eq. (4.75), não representa um vínculo dinâmico. Isso significa que, se a Eq. (4.75) for satisfeita no instante inicial (por exemplo, em $t = 0$), então as variáveis de campo A_i^a vão evoluir de acordo com a Eq. (4.76) de tal forma que a lei de Gauss será obedecida em todos os instantes. Na prática, portanto, para estudar computacionalmente a Mecânica Clássica de YM, basta resolver numericamente a Eq. (4.76) com condições iniciais consistentes com a lei de Gauss.

Agora que conhecemos as equações dinâmicas da Mecânica Clássica de YM, poderíamos proceder à integração numérica delas. Para fazer isso, gostaríamos de empregar o algoritmo simplético apresentado no Capítulo 2. Como discutimos, no entanto, a aplicação do método simplético de integração pode ser feita apenas quando o sistema dinâmico a ser integrado for Hamiltoniano e exige o conhecimento da função de Hamilton correspondente. Sendo assim, antes de prosseguir com um estudo com-

putacional, precisamos derivar a Hamiltoniana da teoria que estamos considerando.

O ponto de partida da nossa derivação é a Lagrangiana que descreve no caso mais geral o campo de *gauge* SU(2) na ausência de fontes, Eq. (4.46). Nessa expressão, substituímos as equações que definem a Mecânica Clássica de YM, Eqs. (4.73) e (4.74). O que resulta desse procedimento é a Lagrangiana L dessa teoria:

$$L = \frac{1}{2} \dot{A}_i^a \dot{A}_i^a - \frac{1}{4} g^2 f^{abc} f^{cde} A_j^a A_j^d A_k^b A_k^e \quad (4.77)$$

Identificamos as variáveis de campo A_i^a com as coordenadas generalizadas do sistema que estamos considerando. Dessa maneira, o *momentum* π_i^a canonicamente conjugado à coordenada A_i^a é dado por

$$\pi_i^a \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{A}_i^a} = \dot{A}_i^a \quad (4.78)$$

Para obter a Hamiltoniana H da Mecânica Clássica de YM, basta submeter a Lagrangiana da Eq. (4.77) a uma transformação de Legendre [11]:

$$\begin{aligned} H &= \pi_i^a \dot{A}_i^a - L \\ &= \frac{1}{2} \pi_i^a \pi_i^a + \frac{1}{4} g^2 f^{abc} f^{cde} A_j^a A_j^d A_k^b A_k^e \end{aligned} \quad (4.79)$$

Utilizando uma notação vetorial para indicar as somas sobre índices de cor e usando a identidade

$$f^{abc} f^{cde} A_j^a A_j^d A_k^b A_k^e = \sum_{j,k=1}^3 (\mathbf{A}_j \times \mathbf{A}_k)^2 \quad (4.80)$$

podemos escrever H na forma mais compacta

$$H = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^3 \pi_j^2 + \frac{1}{4} g^2 \sum_{j,k=1}^3 (\mathbf{A}_j \times \mathbf{A}_k)^2 \quad (4.81)$$

Essa é a Hamiltoniana da Mecânica Clássica de YM. Obviamente, as equações de movimento derivadas dessa função de Hamilton são equivalentes àsquelas dadas na Eq. (4.76). No entanto, a lei de Gauss não pode ser obtida a partir da especificação de H e, neste contexto, precisa ser *imposta*; o vínculo da Eq. (4.75) “desapareceu” quando substituímos as Eqs. (4.73) e (4.74) diretamente na Lagrangiana da teoria de YM na ausência de fontes. Sendo assim, do ponto de vista do formalismo de Hamilton, a Mecânica Clássica de YM é a teoria derivável da Hamiltoniana (4.81)

e cujas variáveis canônicas A_i^a e π_i^a estão sujeitas ao vínculo

$$A_i^b \pi_i^c - A_i^c \pi_i^b = 0 \quad (4.82)$$

Observamos que na Eletrodinâmica a situação análoga à da Mecânica Clássica de YM é trivial. No caso da teoria de Maxwell, as componentes do potencial vetor $\mathbf{A}$ do campo eletromagnético satisfazem a equação $\ddot{A}_i = 0$ ($i = 1, 2, 3$) [33]. Sendo assim, a “Mecânica Clássica de Maxwell” corresponde a uma situação onde o campo elétrico $\mathbf{E}$ é constante: $A_i = -E_i t$.

Agora podemos realizar um estudo computacional da dinâmica do campo de *gauge* SU(2) no presente contexto. Especificamente, vamos justificar o título desta seção mostrando que pode haver comportamento caótico na Mecânica Clássica de YM. Além disso, provaremos que o caos é um elemento presente na teoria sob consideração mesmo quando a configuração de campo é bastante simples. Para fazer isso, consideraremos a configuração do chamado *Ansatz do ouriço* [34]:

$$A_{ia}(t) = \frac{1}{g} \mathcal{O}_{ia} q_a(t), \quad i, a = 1, 2, 3 \quad (4.83)$$

onde não há soma sobre o índice a . Na expressão acima, $\mathcal{O}_{ia}$ são os elementos de uma matriz ortogonal 3×3 arbitrária $\mathcal{O}$ que independe do tempo.

A configuração de campo da Eq. (4.83) é mais simples, pois, ao invés de lidar com as 9 coordenadas generalizadas do caso geral, precisamos estudar apenas o comportamento das 3 novas funções $q_a(t)$ ($a = 1, 2, 3$). Além disso, é possível verificar que a lei de Gauss é trivialmente obedecida quando utilizamos o *Ansatz* do ouriço. Para ver uma discussão sobre a interpretação física dessa configuração em termos dos campos cromoeletrico e cromomagnético, o leitor pode consultar a Ref. [33].

Substituindo a Eq. (4.83) na equação que determina a evolução das variáveis de campo A_i^a , Eq. (4.76), e utilizando a relação de ortogonalidade $\mathcal{O}_{ia} \mathcal{O}_{ib} = \delta_{ab}$, é direto verificar que a dinâmica das funções $q_a(t)$ é determinada por

$$\ddot{q}_a + (q^2 - q_a^2) q_a = 0, \quad a = 1, 2, 3 \quad (4.84)$$

onde

$$q^2 \equiv \sum_{a=1}^3 q_a^2 \quad (4.85)$$

Equivalentemente, podemos escrever

$$\ddot{q}_1 + (q_2^2 + q_3^2)q_1 = 0 \quad (4.86a)$$

$$\ddot{q}_2 + (q_1^2 + q_3^2)q_2 = 0 \quad (4.86b)$$

$$\ddot{q}_3 + (q_1^2 + q_2^2)q_3 = 0 \quad (4.86c)$$

É possível mostrar que o sistema dinâmico dado na Eq. (4.86) é Hamiltoniano, podendo ser derivado da seguinte função de Hamilton:

$$H_{FS} = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2 + p_3^2) + \frac{1}{2}(q_1^2 q_2^2 + q_1^2 q_3^2 + q_2^2 q_3^2) \quad (4.87)$$

onde identificamos as funções q_a com as coordenadas generalizadas do sistema correspondente, de modo que as variáveis p_a são os respectivos *momenta* canonicamente conjugados. Apesar de, por simplicidade, não termos utilizado esta abordagem, poderíamos ter motivado o estudo do SDH (4.86) mostrando que a Hamiltoniana da Mecânica Clássica de YM, Eq. (4.81), pode ser reescrita de tal forma que esta possui um termo proporcional²a H_{FS} [35]. De fato, esse termo é o principal responsável pela riqueza da dinâmica do campo de *gauge* SU(2) na teoria que estamos analisando; o SDH derivável de (4.87) é dito, portanto, o *subsistema fundamental* (“*fundamental subsystem*”) da Mecânica Clássica de YM [17].

Antes de apresentar o estudo do caos na Mecânica Clássica de YM, precisamos introduzir a escala física no problema. Em outras palavras, temos que dizer qual é a ordem de magnitude dos valores que atribuiremos à Hamiltoniana H_{FS} — cujo valor é o único parâmetro do modelo — para simular situações de interesse físico. Com esse objetivo, primeiro fazemos algumas considerações dimensionais. Denote por L a dimensão de comprimento. Então, como as coordenadas q_a na Eq. (4.87) são originalmente variáveis de campo, as dimensões das grandezas físicas envolvidas

²Observamos que a nossa escolha de coordenadas generalizadas difere daquela feita pelos autores da Ref. [35]. Em termos das variáveis q_a que estamos utilizando como coordenadas, as funções x , y e z consideradas em [35] são dadas por $x = g^{-1}q_1$, $y = g^{-1}q_2$ e $z = g^{-1}q_3$. Dessa maneira, pode-se verificar que o fator de proporcionalidade é g^{-2} .

no problema são

$$[q_a] = L^{-1} \quad (4.88a)$$

$$[p_a] = L^{-2} \quad (4.88b)$$

$$[H_{FS}] = L^{-4} \quad (4.88c)$$

onde tomamos a velocidade da luz $c = 1$. Perceba que a Hamiltoniana (4.87) não tem dimensão de energia³e, sim, de densidade de energia.

Para introduzir a escala física no problema, observamos que um valor característico de densidade de energia é aquele relevante nos processos de colisão de íons pesados: $E_c = 1 \text{ GeV fm}^{-3}$ [8]. Como esperamos que estudos como o apresentado aqui possam ter alguma relevância para a compreensão das propriedades do QGP, medimos $H_{FS} = E$ em unidades de E_c , ou seja: $E = \sigma E_c$, onde $0 < \sigma < 10$, de maneira que σ é um número real estritamente positivo da ordem de 1. Esclarecemos que uma especificação de σ será feita na forma da equação $E = \sigma$. A menos que mencionemos o contrário, as considerações feitas neste parágrafo se aplicam a todos os SDH que discutiremos em conexão com as teorias de *gauge*.

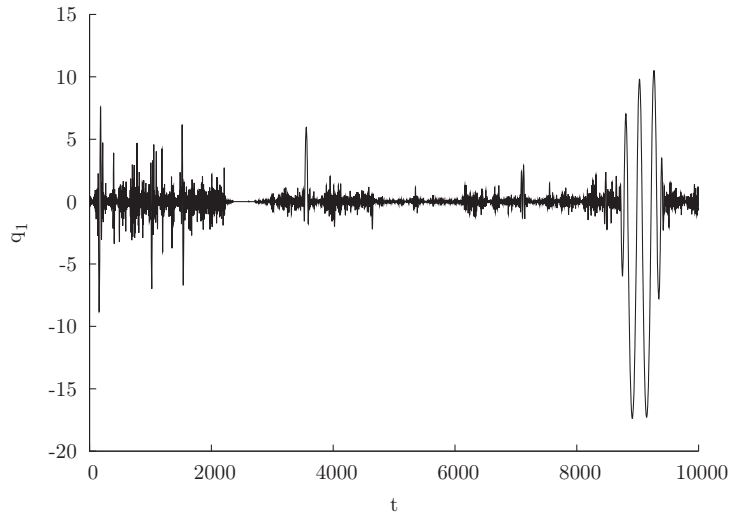


Figura 4.1: Comportamento dinâmico da coordenada generalizada q_1 do SDH da Eq. (4.86) numa situação em que a energia $H_{FS} = E$ do sistema é dada por $E = 1$.

Finalmente, apresentamos o estudo numérico da Mecânica Clássica de YM. Nas Figs. 4.1 e 4.2 estão os resultados da integração do SDH da Eq. (4.86). A Fig. 4.1

³Tomando $c = 1$, temos que a dimensão de energia é L^{-1} .

mostra a evolução da coordenada generalizada q_1 numa situação em que a energia $H_{FS} = E$ do sistema é dada por $E = 1$. O comportamento dinâmico do *momentum* p_1 na mesma situação pode ser visto na Fig. 4.2.

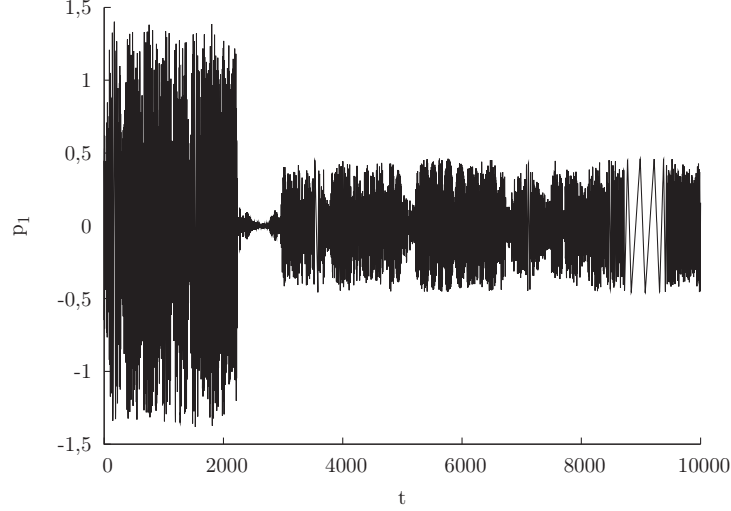


Figura 4.2: Comportamento dinâmico do *momentum* p_1 do SDH da Eq. (4.86) numa situação em que a energia $H_{FS} = E$ do sistema é dada por $E = 1$.

Para encerrar a presente seção, mostramos que há situações em que o campo de YM pode exibir comportamento caótico. Mais precisamente, provamos que a dinâmica das variáveis q_a — relacionadas com as componentes A_{ia} do campo através da Eq. (4.83) — pode ser tal que um cálculo numérico do EML para o SDH da Eq. (4.86) fornece um resultado positivo. Como discutimos, para realizar a determinação do EML, também precisamos resolver numericamente o sistema variacional associado ao da Eq. (4.86). É direto verificar que as equações daquele são

$$\ddot{\xi}_1 = -(q_2^2 + q_3^2)\xi_1 - 2q_1(q_2\xi_2 + q_3\xi_3) \quad (4.89a)$$

$$\ddot{\xi}_2 = -(q_1^2 + q_3^2)\xi_2 - 2q_2(q_1\xi_1 + q_3\xi_3) \quad (4.89b)$$

$$\ddot{\xi}_3 = -(q_1^2 + q_2^2)\xi_3 - 2q_3(q_1\xi_1 + q_2\xi_2) \quad (4.89c)$$

A Fig. 4.3 mostra a função $\chi(t) \equiv \frac{1}{t} \ln |\boldsymbol{\xi}(t)|$ para o SDH derivável da Hamiltoniana (4.87), ou seja, aquela cujo valor no limite $t \rightarrow +\infty$ é o EML. Essa figura corresponde a uma situação em que o valor da energia $H_{FS} = E$ do sistema é dado por $E = 1$. Nesse caso, o resultado da nossa estimativa do EML é $\Lambda = 0,189$. Como esse valor é positivo, provamos que o SDH sob consideração pode apresentar comportamento caótico, de maneira que pode haver caos na teoria de YM.

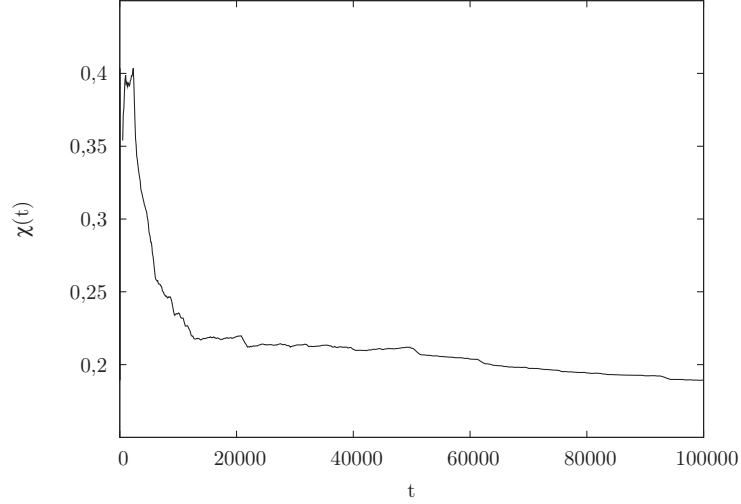


Figura 4.3: Determinação numérica do EML para o SDH derivável da Hamiltoniana (4.87). A função $\chi(t) \equiv \frac{1}{t} \ln |\xi(t)|$ é aquela cujo valor no limite $t \rightarrow +\infty$ é o EML do sistema.

4.4 Modelos de Termalização

O SDH autônomo e ergódico mais simples que pode ser derivado das equações de campo da teoria de YM é aquele obtido da seguinte Hamiltoniana:

$$H_{FS} = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) + \frac{1}{2}q_1^2 q_2^2 \quad (4.90)$$

onde p_j é o *momentum* canonicamente conjugado à coordenada generalizada q_j ($j = 1, 2$). Essa função de Hamilton pode ser obtida a partir da Eq. (4.87) se supusermos que a coordenada generalizada q_3 se anula identicamente: $q_3 = 0$. Fazemos essa simplificação para poder analisar a questão da ergodicidade na Mecânica Clássica de YM usando a técnica da seção de Poincaré. A Fig. 4.4 mostra o resultado da aplicação dessa técnica ao SDH derivável de (4.90) no caso em que a energia $H_{FS} = E$ do sistema é $E = 1$; vemos que a dinâmica do sistema é ergódica como afirmamos. Perceba como o comportamento dinâmico do campo de *gauge* SU(2) pode ser altamente irregular mesmo quando consideramos um caso particular bastante simples da teoria de YM.

O SDH derivável de (4.90), apesar de ergódico no sentido que definimos, não satisfaz uma das exigências da formulação de Berdichevsky da MEC, a saber, o volume no espaço de fase encerrado por uma superfície de energia qualquer não é finito [32].

Essa é uma consequência do fato de que o movimento do sistema no espaço de fase não está restrito a uma região limitada do seu espaço de configuração, de maneira que a integral (3.5) diverge logaritmicamente. Esse SDH não admite, portanto, uma descrição estatística tal qual Berdichevsky e Alberti fizeram para o celebrado sistema de Hénon-Heiles [19, 20].

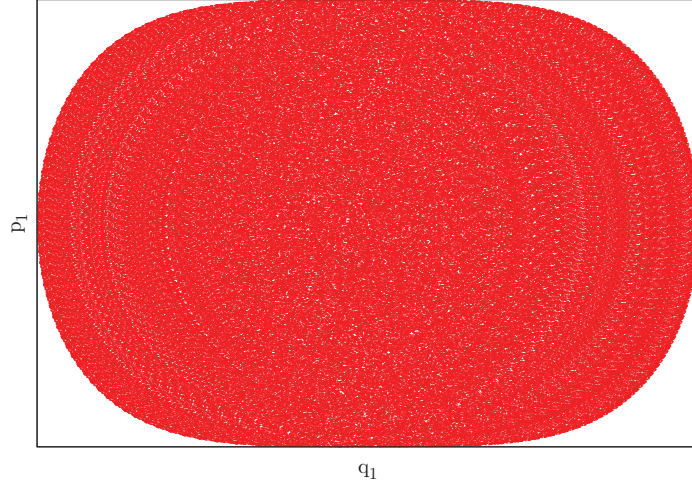


Figura 4.4: Seção de Poincaré do SDH derivável da Hamiltoniana (4.90) no caso em que $H_{FS} = E = 1$.

Uma maneira de contornar essa dificuldade foi proposta por Bannur [7]. Ele considerou o SDH que pode ser derivado da Hamiltoniana

$$H_B = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) + \frac{1}{2}q_1^2 q_2^2 + \frac{1-\alpha}{12}(q_1^4 + q_2^4) \quad (4.91)$$

onde $\alpha \lesssim 1^4$ é um parâmetro adimensional. Essa Hamiltoniana é tal que a função de Hamilton obtida diretamente da teoria de YM, Eq. (4.90), é recobrada no limite $\alpha \rightarrow 1^-$. A introdução de um termo envolvendo a quarta potência das coordenadas generalizadas tem o efeito de regularizar a divergência do volume (3.5) e a vantagem de tornar o sistema físico original formalmente semelhante ao oscilador quártico, que não apenas admite uma descrição estatística como esta pode ser feita completamente de maneira analítica [2].

Apesar dessas qualidades, o modelo de Bannur não é obtido através de uma argu-

⁴Especificamente, o valor do parâmetro α utilizado por Bannur é $\alpha = 0,99$.

mentação física. A única justificativa para a introdução do termo

$$\frac{1-\alpha}{12}(q_1^4 + q_2^4)$$

na Eq. (4.90) é a de que a contribuição deste é pequena em comparação com a dos demais no limite $\alpha \rightarrow 1^-$. Além disso, esse artifício não muda o fato de que, para os nossos propósitos, a Hamiltoniana (4.91) tem um problema quando $\alpha = 1$. De um ponto de vista prático, isso significa que o modelo proposto por Bannur se torna numericamente instável à medida que a dinâmica deste é simulada com valores de α cada vez mais próximos de 1. Sentimos, portanto, a necessidade de considerar um SDH derivável de uma teoria clássica de *gauge* (dessa maneira, com forte motivação física) e que não possui problemas quando analisado computacionalmente.

Capítulo 5

Termalização Caótica na Teoria de Yang-Mills-Higgs

5.1 Quebra Espontânea de Simetria

Em geral, não há razão para esperar que uma invariância da Hamiltoniana de um sistema também seja uma invariância do seu estado fundamental. Isso tem consequências não-triviais se considerarmos sistemas que possuem extensão espacial infinita. Um exemplo que ilustra essas ideias é o *sólido ferromagnético de Heisenberg*, uma rede infinita de dipolos magnéticos com interações entre primeiros vizinhos tais que estes tendem a se alinhar. Apesar da Hamiltoniana desse sistema ser *rotacionalmente invariante*, o seu estado fundamental não é. Este é um estado em que cada um dos dipolos está alinhado numa direção arbitrária. Além disso, o estado fundamental do sólido de Heisenberg é infinitas vezes degenerado.

Um pequeno observador vivendo dentro de um tal sólido no estado fundamental teria dificuldade para detectar a invariância rotacional das “leis da Natureza”. Todos os seus experimentos seriam corrompidos pelo campo magnético externo (de cuja influência nenhum sistema físico realista está realmente livre). Se o seu aparato interagisse fracamente com o campo externo, ele poderia detectar a invariância rotacional como uma simetria aproximada. Se o seu aparato interagisse fortemente com o campo externo, ele poderia afirmar que não há simetria rotacional. Em qualquer caso, ele não teria motivo para imaginar que a invariância rotacional fosse uma simetria exata.

Além disso, o pequeno observador não seria capaz de detectar diretamente que o estado fundamental no qual ele se encontra é apenas uma realização de um estado infinitas vezes degenerado. Uma vez que ele possui extensão espacial finita, o pequeno observador pode mudar de uma vez a direção de apenas um número finito de dipolos magnéticos. No entanto, para ir de um estado fundamental do sólido para

outro, ele precisa mudar a direção de um número infinito de dipolos, uma tarefa impossível para ele.

A princípio, não há nada nessa situação que não pode ser generalizado para uma teoria de campos relativística. A Hamiltoniana do sólido de Heisenberg pode ser substituída pela Hamiltoniana de uma teoria de campos. A invariância rotacional pode ser substituída por alguma simetria interna. O estado fundamental do sólido ferromagnético pode ser substituído pelo estado de vácuo da teoria de campos. E, finalmente, o pequeno observador pode ser substituído por nós. Ou seja, *conjeturamos que as leis da Natureza podem possuir simetrias que não se manifestam para nós, pois o estado de mais baixa energia não é invariante sob as transformações de simetria correspondentes*. Quando isso acontecer, usaremos dizer que houve *quebra espontânea de simetria*.

5.2 Teoria de Yang-Mills-Higgs

Na Seção 4.4, discutimos dois SDHs com dois graus de liberdade que podem apresentar uma dinâmica caótica e, em consequência disso, são ergódicos ou quase ergódicos na superfície de energia. O primeiro sistema dinâmico, que apresentamos e discutimos na Seção 4.3, é derivado diretamente das equações de campo de YM, mas tem o problema de que as superfícies de energia não encerram regiões de volume finito no espaço de fase. O segundo sistema é, por outro lado, engendrado para que este se veja livre do problema da divergência dos volumes. No entanto, o procedimento utilizado para construir a Hamiltoniana desse sistema carece, na nossa opinião, de motivação física, sendo nada mais do que um artifício matemático. O objetivo do restante do presente capítulo é, portanto, apresentar um modelo simplificado que, da mesma maneira que o da Seção 4.3, pode ser derivado diretamente das equações de campo de uma teoria clássica de campos e que, assim como o modelo de Bannur do oscilador quártico, não possui o problema dos volumes infinitos no espaço de fase.

Construção da Lagrangiana Invariante

Com a intenção de atingir o objetivo descrito no parágrafo acima, consideraremos um sistema físico que consiste de campos de YM a interagir com um par de campos escalares complexos. A Lagrangiana que descreve os dois campos escalares numa situação em que eles auto-interagem sem, por outro lado, interagir um com o outro

é dada por

$$\mathcal{L}_0 = (\partial^\mu \varphi_1)^* (\partial_\mu \varphi_1) - \mu_1^2 \varphi_1^* \varphi_1 - \lambda_1 (\varphi_1^* \varphi_1)^2 + (\partial^\mu \varphi_2)^* (\partial_\mu \varphi_2) - \mu_2^2 \varphi_2^* \varphi_2 - \lambda_2 (\varphi_2^* \varphi_2)^2 \quad (5.1)$$

onde φ_1 e φ_2 denotam os dois campos escalares complexos, μ_k é um parâmetro relacionado com a massa do campo φ_k tal que $\mu_k^2 < 0$ e $\lambda_k > 0$ é uma constante que mede a intensidade da auto-interação de φ_k ($k = 1, 2$). Essa é a Lagrangiana correta, pois as equações de movimento correspondentes têm a forma de equações de Klein-Gordon para os campos φ_k .

Considere agora a situação em que $\mu_1 = \mu_2 \equiv \mu$ e $\lambda_1 = \lambda_2 \equiv \lambda$. Suponha ainda que a Lagrangiana de interação entre os campos escalares complexos é dada por

$$\mathcal{L}_{\varphi_1-\varphi_2} = -2\lambda \varphi_1^* \varphi_1 \varphi_2^* \varphi_2 \quad (5.2)$$

Dessa maneira, a Lagrangiana que descreve os campos na situação em que um também interage com o outro é

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_\varphi = \mathcal{L}_0 + \mathcal{L}_{\varphi_1-\varphi_2} &= (\partial^\mu \varphi_1)^* (\partial_\mu \varphi_1) + (\partial^\mu \varphi_2)^* (\partial_\mu \varphi_2) - \mu^2 (\varphi_1^* \varphi_1 + \varphi_2^* \varphi_2) - \\ &\quad - \lambda [(\varphi_1^* \varphi_1)^2 + (\varphi_2^* \varphi_2)^2 + 2\varphi_1^* \varphi_1 \varphi_2^* \varphi_2] \end{aligned} \quad (5.3)$$

Da mesma maneira que fizemos com os dois campos de Dirac na Seção 4.2.2, organizaremos os campos φ_1 e φ_2 num vetor coluna com duas entradas, que denotaremos por φ :

$$\varphi \equiv \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{bmatrix} \quad (5.4)$$

Usando essa notação, a Lagrangiana $\mathcal{L}_\varphi$ pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$\mathcal{L}_\varphi = (\partial^\mu \varphi)^\dagger (\partial_\mu \varphi) - \mu^2 \varphi^\dagger \varphi - \lambda (\varphi^\dagger \varphi)^2 \quad (5.5)$$

O procedimento para obter uma teoria invariante sob transformações de *gauge* SU(2) é o mesmo que utilizamos na Seção 4.2.2 para construir a Lagrangiana da teoria de YM. É direto verificar que a Lagrangiana (5.5) é invariante sob a transformação global

$$\varphi(x) \rightarrow \varphi'(x) = S\varphi(x) \quad (5.6a)$$

$$\varphi^\dagger(x) \rightarrow \varphi'^\dagger(x) = \varphi^\dagger(x) S^\dagger \quad (5.6b)$$

onde $S \in \text{SU}(2)$. Agora a proposta é estender essa invariância de $\mathcal{L}_\varphi$ para o caso das transformações locais, ou seja, para o caso em que a matriz de transformação S é uma função das coordenadas do espaço-tempo onde os campos estão sendo avaliados. É possível verificar que, submetendo os campos a uma transformação da forma

$$\varphi(x) \rightarrow \varphi'(x) = S(x)\varphi(x) \quad (5.7a)$$

$$\varphi^\dagger(x) \rightarrow \varphi'^\dagger(x) = \varphi^\dagger(x)S^\dagger(x) \quad (5.7b)$$

onde x denota um ponto do espaço-tempo, a Lagrangiana (5.5) se transforma de acordo com

$$\mathcal{L}_\varphi \rightarrow \mathcal{L}'_\varphi = \mathcal{L}_\varphi + \varphi^\dagger(\partial^\mu S^\dagger)(\partial_\mu S)\varphi + \varphi^\dagger(\partial^\mu S^\dagger)S\partial_\mu\varphi + (\partial^\mu\varphi)^\dagger S^\dagger(\partial_\mu S)\varphi \quad (5.8)$$

o que mostra claramente que $\mathcal{L}_\varphi$ não é invariante sob uma tal transformação local. Sabemos da Seção 4.2.2, no entanto, que essa Lagrangiana pode ser feita invariante sob transformações $\text{SU}(2)$ locais através da substituição $\partial_\mu \rightarrow \nabla_\mu$, onde ∇_μ é a derivada covariante de *gauge* introduzida anteriormente:

$$\nabla_\mu = \partial_\mu - ig\mathbf{A}_\mu \cdot \boldsymbol{\tau} \quad (5.9)$$

Como antes, desde que $\mathbf{A}_\mu \cdot \boldsymbol{\tau}$ se transforme de acordo com

$$\mathbf{A}_\mu \cdot \boldsymbol{\tau} \rightarrow \mathbf{A}'_\mu \cdot \boldsymbol{\tau} = S(\mathbf{A}_\mu \cdot \boldsymbol{\tau})S^{-1} + \frac{1}{ig}(\partial_\mu S)S^{-1} \quad (5.10)$$

teremos a lei de transformação

$$\nabla_\mu\varphi(x) \rightarrow \nabla'_\mu\varphi'(x) = S(x)\nabla_\mu\varphi(x) \quad (5.11)$$

de maneira que a Lagrangiana

$$\mathcal{L}_\varphi = (\nabla^\mu\varphi)^\dagger(\nabla_\mu\varphi) - \mu^2\varphi^\dagger\varphi - \lambda(\varphi^\dagger\varphi)^2 \quad (5.12)$$

é invariante sob transformações de *gauge* $\text{SU}(2)$, como queríamos. A Lagrangiana $\mathcal{L}$ da teoria completa é obtida através da inclusão do termo invariante sob transformações de *gauge* $\text{SU}(2)$ $\mathcal{L}_\mathbf{A}$, que introduzimos na Seção 4.2.2 e que descreve a dinâmica livre do campo de *gauge* $\mathbf{A}_\mu$:

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_\mathbf{A} + \mathcal{L}_\varphi = -\frac{1}{4}\mathbf{F}^{\mu\nu} \cdot \mathbf{F}_{\mu\nu} + (\nabla^\mu\varphi)^\dagger(\nabla_\mu\varphi) - \mu^2\varphi^\dagger\varphi - \lambda(\varphi^\dagger\varphi)^2 \quad (5.13)$$

A Lagrangiana (5.13) descreve um par de campos escalares complexos interagindo com o campo de YM. Essa teoria representa a generalização não-Abeliana do modelo de Higgs considerado na Ref. [36], que consiste de um campo escalar complexo interagindo com um campo de *gauge* $U(1)$. Daqui em diante, portanto, iremos chamar essa teoria de *teoria de Yang-Mills-Higgs* (YMH).

Quebra Espontânea da Simetria

O nosso objetivo agora que a Lagrangiana da teoria foi construída é usar o fato de que, uma vez que $\mu^2 < 0$, o estado de vácuo da teoria não é único para definir as variáveis de campo apropriadas e, em seguida, pôr a Lagrangiana da teoria numa forma conveniente para obter o SDH cuja MEC estudaremos. Então defina a constante $v > 0$ por

$$v \equiv \left(\frac{-\mu^2}{2\lambda} \right)^{1/2} \quad (5.14)$$

Utilizando o fato de que a inclusão de um termo constante na Lagrangiana (5.13) não altera a sua dinâmica, é possível concluir que a Lagrangiana da teoria de YMH é equivalente a

$$\mathcal{L} = (\nabla^\mu \varphi)^\dagger (\nabla_\mu \varphi) - \mu^2 \varphi^\dagger \varphi - \lambda (\varphi^\dagger \varphi)^2 - \lambda \left(\frac{-\mu^2}{2\lambda} \right)^2 - \frac{1}{4} \mathbf{F}^{\mu\nu} \cdot \mathbf{F}_{\mu\nu} \quad (5.15)$$

ou, reagrupando os termos:

$$\mathcal{L} = (\nabla^\mu \varphi)^\dagger (\nabla_\mu \varphi) - \lambda (\varphi^\dagger \varphi - v^2)^2 - \frac{1}{4} \mathbf{F}^{\mu\nu} \cdot \mathbf{F}_{\mu\nu} \quad (5.16)$$

Como discutido na Ref. [37], a configuração de campo correspondente ao vácuo é aquela para a qual o termo de “energia potencial” $\lambda (\varphi^\dagger \varphi - v^2)^2$ se anula. Portanto, escrever a Lagrangiana de YMH na forma da Eq. (5.16) torna evidente o fato de que o vácuo da teoria é infinitas vezes degenerado, sendo definido pela condição

$$|\varphi_1|^2 + |\varphi_2|^2 = v^2 \quad (5.17)$$

Observamos que a condição acima preserva a sua forma quando submetemos os campos φ e $\varphi^\dagger$ a transformações de *gauge* $SU(2)$ locais. Isso significa que o vácuo da teoria que estamos considerando é invariante sob tais transformações. Utilizamos agora a suposição de que, na realidade, o vácuo não possui essa propriedade e implementamos a quebra da simetria de *gauge* $SU(2)$. Para tanto, o que fazemos é

selecionar uma das várias configurações do campo φ associadas ao vácuo da teoria em questão, ou seja, que respeitam a condição (5.17) e introduzir novas variáveis de campo que medem o desvio de φ em relação à configuração de vácuo escolhida. Uma maneira de implementar esse esquema é a seguinte: considere o estado de vácuo para o qual $\varphi = \varphi_0$, onde

$$\varphi_0 = \begin{bmatrix} 0 \\ v \end{bmatrix} \quad (5.18)$$

e introduza a variação η em relação a esse vácuo:

$$\eta = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \imath J_1 + J_2 \\ \chi - \imath J_3 \end{bmatrix} \quad (5.19)$$

Nesse caso, escrevemos o campo φ da seguinte maneira:

$$\varphi = \varphi_0 + \eta = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \imath J_1 + J_2 \\ \sqrt{2}v + \chi - \imath J_3 \end{bmatrix} \quad (5.20)$$

Para os nossos propósitos, o conteúdo físico do assunto da presente seção já foi explorado. Portanto, o que fazemos na sequência é esquematizar a derivação da expressão para a Lagrangiana (5.16) em termos das variáveis de campo χ e J_a ($a = 1, 2, 3$). Usando a expressão para φ , Eq. (5.20), verifica-se facilmente que $\varphi^\dagger$ é dado por

$$\varphi^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} -\imath J_1 + J_2 & \sqrt{2}v + \chi + \imath J_3 \end{bmatrix} \quad (5.21)$$

onde também usamos o fato de que as variáveis χ e J_a são reais. Dessa maneira, é possível concluir que a expressão para $\varphi^\dagger \varphi$ é a seguinte:

$$\varphi^\dagger \varphi = \frac{1}{2} (J_a J_a + 2v^2 + \chi^2 + \sqrt{8}v\chi) \quad (5.22)$$

onde a soma sobre o índice repetido a está implícita. Em posse da última relação, mostra-se através de um cálculo direto porém tedioso que a seguinte equação é válida:

$$\begin{aligned} (\varphi^\dagger \varphi - v^2)^2 &= \frac{1}{4} (J_a J_a J_b J_b + \chi^4 + 8v^2 \chi^2 + 4\sqrt{2}v\chi^3 + 2J_a J_a \chi^2 + 4\sqrt{2}J_a J_a v\chi) \\ &= \left[\frac{1}{2} J_a J_a + \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \chi + v \right)^2 - v^2 \right]^2 \end{aligned} \quad (5.23)$$

A Eq. (5.23) determina, portanto, o segundo termo da Lagrangiana (5.16). A determinação do primeiro termo é ligeiramente mais complicada, devido à forma da derivada $\nabla_\mu \varphi$:

$$\nabla_\mu \varphi = \partial_\mu \varphi - ig \mathbf{A}_\mu \cdot \boldsymbol{\tau} \varphi \quad (5.24)$$

O primeiro termo do lado direito da Eq. (5.24) é facilmente obtido a partir da expressão para o campo φ , Eq. (5.20):

$$\partial_\mu \varphi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} i\partial_\mu J_1 + \partial_\mu J_2 \\ \partial_\mu \chi - i\partial_\mu J_3 \end{bmatrix} \quad (5.25)$$

Para reescrever o termo $ig \mathbf{A}_\mu \cdot \boldsymbol{\tau} \varphi$, primeiro relembre a definição de $\boldsymbol{\tau}$ em termos das matrizes de Pauli $\boldsymbol{\sigma}$,

$$\boldsymbol{\tau} = \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} \quad (5.26)$$

ou, equivalentemente:

$$\tau^1 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (5.27a)$$

$$\tau^2 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad (5.27b)$$

$$\tau^3 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (5.27c)$$

Usando a forma explícita dos geradores $\boldsymbol{\tau}$ do grupo de *gauge* SU(2), é direto mostrar que

$$\mathbf{A}_\mu \cdot \boldsymbol{\tau} = A_\mu^1 \tau^1 + A_\mu^2 \tau^2 + A_\mu^3 \tau^3 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} A_\mu^3 & A_\mu^1 - iA_\mu^2 \\ A_\mu^1 + iA_\mu^2 & -A_\mu^3 \end{bmatrix} \quad (5.28)$$

Multiplicando o vetor coluna da Eq. (5.20) pela matriz na Eq. (5.28), obtemos a seguinte expressão:

$$\mathbf{A}_\mu \cdot \boldsymbol{\tau} \varphi = \frac{1}{\sqrt{8}} \begin{bmatrix} A_\mu^3(iJ_1 + J_2) + (A_\mu^1 - iA_\mu^2)(\sqrt{2}v + \chi - iJ_3) \\ (A_\mu^1 + iA_\mu^2)(iJ_1 + J_2) - A_\mu^3(\sqrt{2}v + \chi - iJ_3) \end{bmatrix} \quad (5.29)$$

Substituindo o resultado acima e aquele dado pela Eq. (5.25) na expressão que determina a derivada $\nabla_\mu \varphi$, Eq. (5.24), temos

$$\nabla_\mu \varphi = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\imath \partial_\mu J_1 + \partial_\mu J_2 \right] - \frac{\imath g}{\sqrt{8}} \left[A_\mu^3 (\imath J_1 + J_2) + (A_\mu^1 - \imath A_\mu^2) (\sqrt{2}v + \chi - \imath J_3) \right] \quad (5.30)$$

Para completar o cálculo do primeiro termo da Lagrangiana de YMH, Eq. (5.16), procederíamos com a obtenção da fórmula para $(\nabla^\mu \varphi)^\dagger$ a partir da Eq. (5.30) e, posteriormente, com o cálculo de $(\nabla^\mu \varphi)^\dagger (\nabla_\mu \varphi)$. Limitamo-nos a escrever o resultado final:

$$\begin{aligned} (\nabla^\mu \varphi)^\dagger (\nabla_\mu \varphi) = & \frac{1}{2} (\partial^\mu J_a \partial_\mu J_a + \partial^\mu \chi \partial_\mu \chi) + \frac{1}{2} g [A^{a\mu} J_a \partial_\mu \chi + f^{abc} A^{a\mu} J_b \partial_\mu J_c - \\ & - (\chi + \sqrt{2}v) A^{a\mu} \partial_\mu J_a] + \frac{1}{4} g^2 (A^{a\mu} A_\mu^a) \left[\frac{1}{2} J_b J_b + \left(\frac{\chi}{\sqrt{2}} + v \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (5.31)$$

Então, finalmente, fazendo uso das Eqs. (5.23) e (5.31), reescrevemos a Lagrangiana da teoria, Eq. (5.16), da forma desejada:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & -\frac{1}{4} \mathbf{F}^{\mu\nu} \cdot \mathbf{F}_{\mu\nu} + \frac{1}{2} (\partial^\mu J_a \partial_\mu J_a + \partial^\mu \chi \partial_\mu \chi) + \frac{1}{2} g [A^{a\mu} J_a \partial_\mu \chi + f^{abc} A^{a\mu} J_b \partial_\mu J_c - \\ & - (\chi + \sqrt{2}v) A^{a\mu} \partial_\mu J_a] + \frac{1}{4} g^2 (A^{a\mu} A_\mu^a) \left[\frac{1}{2} J_b J_b + \left(\frac{\chi}{\sqrt{2}} + v \right)^2 \right] - \\ & - \lambda \left[\frac{1}{2} J_a J_a + \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \chi + v \right)^2 - v^2 \right]^2 \end{aligned} \quad (5.32)$$

Essa é a Lagrangiana que usaremos para derivar o SDH cuja MEC estudaremos na Seção 5.4. Ela tem origem na Lagrangiana invariante sob transformações de *gauge* SU(2) locais, Eq. (5.16), e na posterior quebra dessa simetria através da introdução das variáveis de campo χ e J_a na Eq. (5.20).

5.3 Mecânica Clássica de Yang-Mills-Higgs

Da mesma maneira que fizemos quando discutimos a dinâmica do campo de *gauge* SU(2) na ausência de fontes, fazemos agora a passagem para a formulação Hamiltoniana do problema. Novamente, isso vai envolver a introdução de hipóteses simplificadoras. A explicação sobre a necessidade dessa passagem e a justificativa para a utilização de certas hipóteses já foram apresentadas no capítulo anterior; nesta seção, portanto, apenas esquematizamos a derivação dos principais resultados

necessários para reformular o problema de maneira conveniente.

Começamos derivando o equivalente da lei de Gauss no contexto da teoria de YMH. É direto verificar que as seguintes relações são válidas para a Lagrangiana da Eq. (5.32):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_\rho^d} = & g f^{abd} F^{a\rho\mu} A_\mu^b + \frac{1}{2} g [J_d \partial^\rho \chi + f^{dbc} J_b \partial^\rho J_c - (\sqrt{2}v + \chi) \partial^\rho J_d] + \\ & + \frac{1}{2} g^2 A^{d\rho} \left[\frac{1}{2} J_b J_b + \left(\frac{\chi}{\sqrt{2}} + v \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (5.33)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\lambda A_\rho^d)} = F^{d\rho\lambda} \quad (5.34)$$

Com esses resultados, pode-se mostrar que as equações de campo para A_μ^a são dadas por

$$\begin{aligned} \partial_\lambda F^{d\rho\lambda} = & g f^{abd} F^{a\rho\mu} A_\mu^b + \frac{1}{2} g [J_d \partial^\rho \chi + f^{dab} J_a \partial^\rho J_b - \sqrt{2} \left(\frac{\chi}{\sqrt{2}} + v \right) \partial^\rho J_d] + \\ & + \frac{1}{2} g^2 A^{d\rho} \left[\frac{1}{2} J_b J_b + \left(\frac{\chi}{\sqrt{2}} + v \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (5.35)$$

Vamos supor que as variáveis de campo A_0^a se anulam identicamente para $a = 1, 2, 3$. Além disso, introduzimos a hipótese de que todos os campos que restaram são uniformes. O caso particular que acabamos de definir da teoria derivável da Lagrangiana $\mathcal{L}$ na Eq. (5.32) é o que chamaremos de *Mecânica Clássica de YMH*.

Utilizando essas suposições e o fato de que a lei de Gauss corresponde à componente $\rho = 0$ da Eq. (5.35), deduzimos que esse vínculo é

$$f^{abc} A_j^b \dot{A}_j^c = \frac{v}{\sqrt{2}} \dot{J}_a + \frac{1}{2} (\chi \dot{J}_a - J_a \dot{\chi} - f^{abc} J_b \dot{J}_c) \quad (5.36)$$

Como no caso da Mecânica Clássica de YM, a validade da lei de Gauss precisa ser imposta quando estudamos este problema à luz do formalismo de Hamilton. A última relação deve suplementar a especificação da Hamiltoniana da Mecânica Clássica de YMH, que gostaríamos de obter agora. Mais uma vez, partimos da Lagrangiana que descreve o comportamento dos campos na situação mais geral, Eq. (5.32). Utilizando as hipóteses que definem a teoria que estamos apresentando,

verifica-se que a Lagrangiana L desta é dada por

$$L = L_{YM} + \frac{1}{2}(\dot{J}_a \dot{J}_a + \dot{\chi}^2) + \frac{1}{4}g^2(A^{ak}A_k^a) \left[\frac{1}{2}J_b J_b + \left(\frac{\chi}{\sqrt{2}} + v \right)^2 \right] - \lambda \left[\frac{1}{2}J_a J_a + \left(\frac{\chi}{\sqrt{2}} + v \right)^2 - v^2 \right]^2 \quad (5.37)$$

onde L_{YM} denota a Lagrangiana da Mecânica Clássica de YM, Eq. (4.77). Novamente, identificamos as variáveis de campo que aparecem na equação acima com as coordenadas generalizadas do problema. Sendo assim, é direto mostrar que os *momenta* canonicamente conjugados são

$$\pi_j^a \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{A}_j^a} = \dot{A}_j^a \quad (5.38a)$$

$$P_a \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{J}_a} = \dot{J}_a \quad (5.38b)$$

$$P_\chi \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{\chi}} = \dot{\chi} \quad (5.38c)$$

A função de Hamilton H que buscamos pode ser obtida a partir da Lagrangiana L , Eq. (5.37), através de uma transformação de Legendre. Neste caso, essa transformação é dada por

$$H = \pi_j^a \dot{A}_j^a + P_a \dot{J}_a + P_\chi \dot{\chi} - L \quad (5.39)$$

Usando a relação acima, mostra-se que a Hamiltoniana da Mecânica Clássica de YMH é

$$H = H_{YM} + \frac{1}{2}(P_a P_a + P_\chi^2) + \frac{1}{4}g^2(A_j^a A_j^a) \left[\frac{1}{2}J_b J_b + \left(\frac{\chi}{\sqrt{2}} + v \right)^2 \right] + \lambda \left[\frac{1}{2}J_a J_a + \left(\frac{\chi}{\sqrt{2}} + v \right)^2 - v^2 \right]^2 \quad (5.40)$$

onde H_{YM} denota a Hamiltoniana da Mecânica Clássica de YM, Eq. (4.81). Portanto, do ponto de vista do formalismo Hamiltoniano, a Mecânica Clássica de YMH é a teoria derivável da função de Hamilton (5.40) e cujas variáveis canônicas respeitam o vínculo

$$f^{abc} A_j^b \pi_j^c = \frac{v}{\sqrt{2}} P_a + \frac{1}{2}(\chi P_a - J_a P_\chi - f^{abc} J_b P_c) \quad (5.41)$$

No entanto, da mesma maneira que fizemos no caso da Mecânica Clássica de YM, não estudamos o caso mais geral no presente contexto. Para introduzir a simplificação que utilizaremos, lembramos que na teoria de YM um comportamento dinâmico caótico por parte do campo de *gauge* $SU(2)$ pode ser observado se considerarmos a configuração de campo do *Ansatz* do ouriço, Eq. (4.83). Uma vez que a matriz identidade 3×3 é uma matriz ortogonal, uma realização dessa configuração tem $\mathcal{O}_{ia} = \delta_{ia}$ ($i, a = 1, 2, 3$). Nesse caso, as únicas componentes do campo de YM que não se anulam identicamente são A_1^1 , A_2^2 e A_3^3 . Lembramos também que, para poder analisar a questão da ergodicidade na Mecânica Clássica de YM usando a técnica da seção de Poincaré, estudamos a situação simplificada em que $q_3 = 0$. Para a forma particular do *Ansatz* do ouriço que estamos considerando, isso corresponde a tomar $A_3^3 = 0$.

Portanto, a simplificação que faremos consiste em supor que, exceto por A_1^1 e A_2^2 , todas as variáveis de campo do problema se anulam identicamente. Utilizando essa hipótese, é direto verificar que a Hamiltoniana da Mecânica Clássica de YMH, Eq. (5.40), se reduz a

$$H = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) + \frac{1}{2}g^2 q_1^2 q_2^2 + \frac{1}{4}g^2 v^2(q_1^2 + q_2^2) \quad (5.42)$$

onde definimos $A_1^1 \equiv q_1$ e $A_2^2 \equiv q_2$ como as coordenadas generalizadas do sistema e p_1, p_2 são os respectivos *momenta* canonicamente conjugados. Também notamos que, para a configuração dos campos que estamos considerando, a lei de Gauss, Eq. (5.41), é trivialmente satisfeita. Sendo assim, o SDH cuja MEC estudaremos é o que pode ser derivado da função de Hamilton acima.

5.4 Resultados

Nos parágrafos acima, consideramos a construção de um SDH que resulta das equações de campo da teoria de YM não na ausência de fontes e, sim, na presença de um par de campos escalares complexos. O sistema de campos de *gauge* com quebra espontânea da simetria $SU(2)$ é estudado numa situação tal que as componentes do campo $A_1^1 \equiv q_1$ e $A_2^2 \equiv q_2$ são as únicas variáveis de campo do problema que não se anulam identicamente. Além disso, estas dependem apenas do tempo t de acordo com observadores num certo referencial de Minkowski. O sistema de equações que determina a dinâmica desse sistema físico pode ser obtido da função de Hamilton

$$H_M = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) + \frac{1}{2}g^2 q_1^2 q_2^2 + \frac{1}{4}g^2 v^2(q_1^2 + q_2^2) \quad (5.43)$$

onde g é a constante de acoplamento de *gauge* e v é o valor esperado no vácuo do campo de Higgs, isto é, do campo φ da Seção 5.2.

Fazendo a seguinte mudança de variáveis:

$$q_1 \rightarrow vq_1 \quad (5.44a)$$

$$q_2 \rightarrow vq_2 \quad (5.44b)$$

$$t \rightarrow \frac{1}{gv}t \quad (5.44c)$$

é possível mostrar que o sistema dinâmico derivável de H_M possui a mesma dinâmica intrínseca que o sistema dinâmico derivável de

$$H = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) + \frac{1}{2}q_1^2 q_2^2 + \frac{1}{4}(q_1^2 + q_2^2) \quad (5.45)$$

Os valores constantes das Hamiltonianas (5.43) e (5.45) estão relacionados através de

$$H = \frac{H_M}{g^2 v^4} \equiv \frac{1}{4\kappa} \quad (5.46)$$

onde

$$\kappa \equiv \frac{g^2 v^4}{4H_M} \quad (5.47)$$

é um parâmetro introduzido por Matinyan e colaboradores cujo valor variamos para simular situações dinâmicas diferentes [38].

Uma das afirmações feitas na Ref. [38] é a de que a introdução do par de campos escalares complexos tem o efeito de “regularizar” o comportamento caótico do SDH derivável de (4.90) (note que as duas Hamiltonianas diferem apenas pelo último termo na Eq. (5.45)). O valor de κ para o qual ocorre a transição comportamento regular-comportamento caótico foi fornecido: $\kappa = \kappa_c \approx 0,15$.

Equações de Movimento

Estudaremos as equações de movimento que são obtidas de (5.45), uma vez que elas possuem as características intrínsecas (isto é, independentes de parâmetros) do sistema de YMH (5.43). Enfatizamos, porém, que a função de Hamilton derivada diretamente de um problema em teoria de campos é dada pela Eq. (5.43). Isso é importante, pois as considerações dimensionais feitas anteriormente — usadas para introduzir a escala física em problemas como o que estamos considerando — não se

aplicam às variáveis na Eq. (5.45), uma vez que $[v] = L^{-1}$. No entanto, as simulações feitas com base na Hamiltoniana (5.45) podem fornecer os resultados “dependentes de parâmetros” — para os quais as nossas considerações dimensionais são válidas — se fizermos a transformação inversa de variáveis relativamente à Eq. (5.44).

Escrevendo as equações de Hamilton correspondentes a H , chegamos diretamente ao sistema

$$\dot{q}_1 = p_1 \quad (5.48a)$$

$$\dot{q}_2 = p_2 \quad (5.48b)$$

$$\dot{p}_1 = -\frac{1}{2}q_1(2q_2^2 + 1) \quad (5.48c)$$

$$\dot{p}_2 = -\frac{1}{2}q_2(2q_1^2 + 1) \quad (5.48d)$$

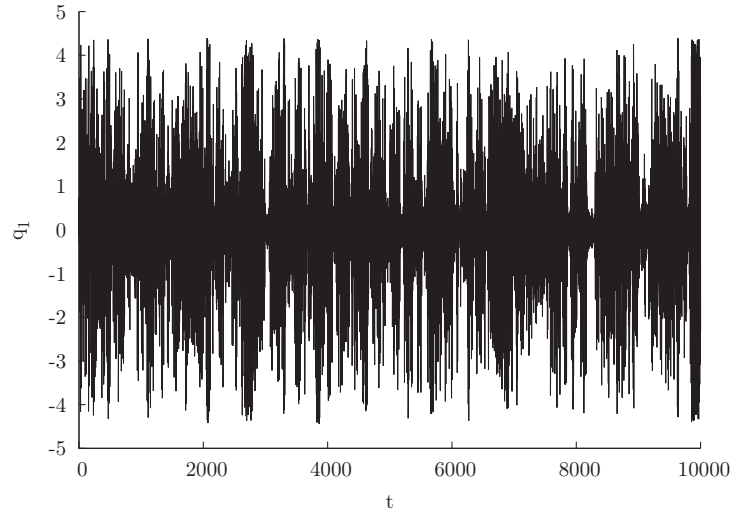


Figura 5.1: Comportamento dinâmico da coordenada generalizada q_1 do sistema de YMH numa situação em que a energia $H = E$ é dada por $E = 5$.

onde os pontos denotam diferenciações em relação ao parâmetro de evolução t . Esse sistema de equações foi integrado numericamente com o auxílio de um algoritmo simplético de quarta ordem [13]. O comportamento das variáveis canônicas para $\kappa = 0,05$ está representado através da solução para a coordenada generalizada q_1 e para o *momentum* p_1 nas Figs. 5.1 e 5.2. Perceba como a evolução das variáveis consideradas é altamente irregular.

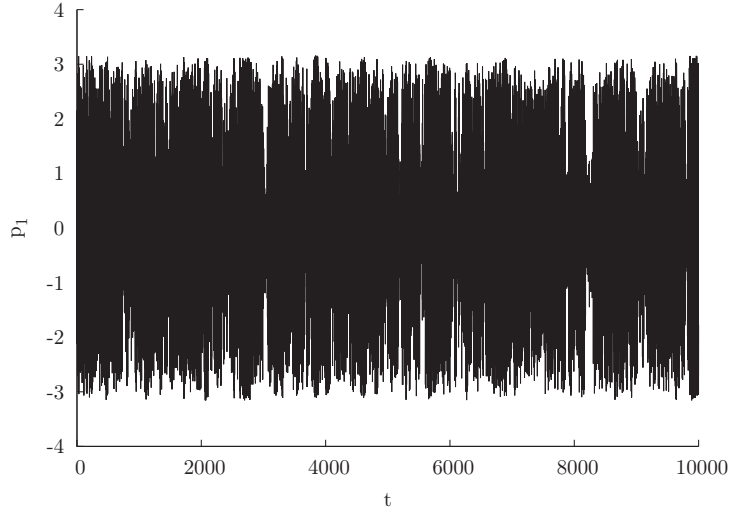


Figura 5.2: Comportamento dinâmico do *momentum* p_1 do sistema de YMH numa situação em que a energia $H = E$ é dada por $E = 5$.

Caos

Em primeiro lugar, estabelecemos o SDH em questão como um sistema cujo comportamento pode se revelar caótico. Entendemos o caos no sentido de Lyapunov, o que significa que chamaremos uma solução do sistema de equações (5.48) de caótica se o EML calculado com esta como trajetória fiducial for positivo. Calculamos numericamente o EML para o sistema (5.48) e mostramos que há valores de κ para os quais o resultado é positivo. Isso significa que duas soluções de (5.48) associadas a condições iniciais ligeiramente diferentes, quando encaradas como curvas no espaço de fase, divergem de tal forma que a separação entre elas cresce exponencialmente.

Lembramos que o EML Λ é o valor assintótico da função $\chi(t) \equiv \frac{1}{t} \ln |\xi(t)|$, determinada computacionalmente quando estudamos a evolução da separação das duas soluções mencionadas acima:

$$\Lambda = \lim_{t \rightarrow +\infty} \chi(t) \quad (5.49)$$

Como discutimos no Capítulo 2, essa determinação exige que nós integremos numericamente o sistema variacional associado ao da Eq. (5.48). É direto verificar que

aquele é dado por

$$\dot{\xi}_1 = \xi_3 \quad (5.50a)$$

$$\dot{\xi}_2 = \xi_4 \quad (5.50b)$$

$$\dot{\xi}_3 = -\frac{1}{2}(1 + 2q_2^2)\xi_1 - 2q_1q_2\xi_2 \quad (5.50c)$$

$$\dot{\xi}_4 = -2q_1q_2\xi_1 - \frac{1}{2}(1 + 2q_1^2)\xi_2 \quad (5.50d)$$

Na Fig. 5.3, exibimos o gráfico da função $\chi(t)$ para o sistema (5.48) no caso em que o valor do parâmetro κ é $\kappa = 0,05$. Claramente, $\chi(t)$ tende nesse caso a um valor positivo, de maneira que Λ é positivo. Estimamos que o valor deste é $\Lambda = 0,465$. Sendo assim, mostramos, através da consideração de um caso específico, que o SDH derivado de (5.45) pode exibir soluções caóticas no sentido de Lyapunov.

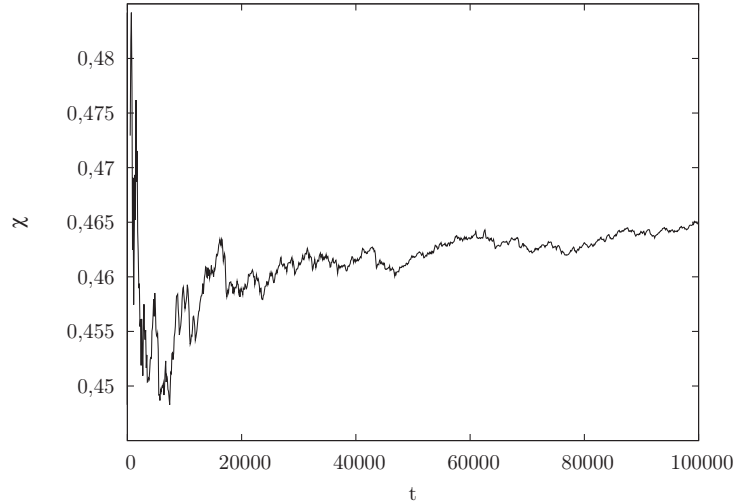


Figura 5.3: Determinação numérica do EML para o sistema de YMH. A função $\chi(t) \equiv \frac{1}{t} \ln |\boldsymbol{\xi}(t)|$ é aquela cujo valor no limite $t \rightarrow +\infty$ é o EML do sistema.

Ergodicidade

Agora que estabelecemos a caoticidade do sistema de YMH (5.48), temos elementos para suspeitar que o caos pode induzir um comportamento tão irregular por parte das soluções que o sistema pode vir a se revelar ergódico na superfície de energia. Para considerar computacionalmente essa questão, empregamos a técnica da seção de Poincaré. Como discutimos no Capítulo 2, olhar para a figura formada pelos pares ordenados (q_2, p_2) nos permite fazer uma afirmação a respeito da ergodicidade

do sistema.

Quando o SDH for integrável, o movimento deste no espaço de fase estará limitado à superfície de um toroide [15]. Sendo assim, os pontos onde a sua curva integral cruza a superfície de seção estão distribuídos sobre uma curva fechada. Esperamos observar um fenômeno parecido mesmo quando o comportamento dinâmico do sistema desviar pouco do de um SDH integrável, ou seja, quando a dinâmica daquele for regular, apesar do sistema em questão não ser integrável. Note como isso está de acordo com a noção de que um comportamento caótico é capaz de dar origem a uma dinâmica ergódica. Por outro lado, se o sistema for ergódico na superfície de energia, então os pontos obtidos com a técnica da seção de Poincaré vão preencher densamente uma região de área finita do plano $q_2 - p_2$.

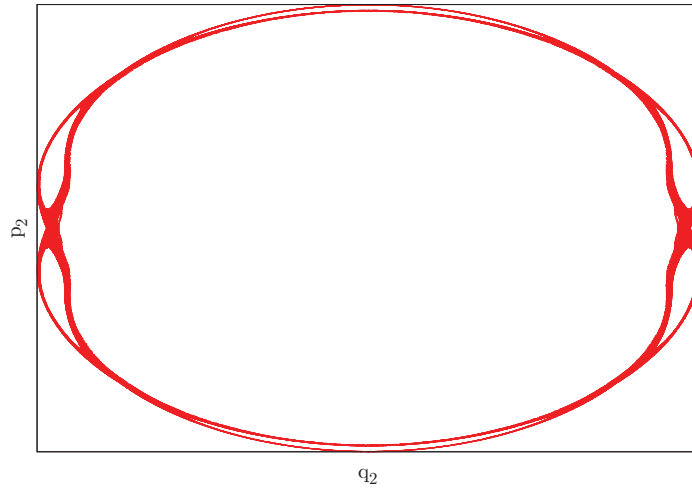


Figura 5.4: Pontos obtidos usando a técnica da seção de Poincaré para o sistema de YMH no caso em que $\kappa = 0,49749844$.

As Figs. 5.4, 5.5 e 5.6 mostram no plano $q_2 - p_2$ os pontos obtidos usando a técnica da seção de Poincaré para o sistema de YMH. A Fig. 5.4 corresponde ao valor do parâmetro κ dado por $\kappa = 0,49749844$. Nesse caso, uma vez que os pontos estão sobre uma curva fechada, o comportamento do sistema desvia pouco em relação ao de um sistema integrável e dizemos que a dinâmica é regular.

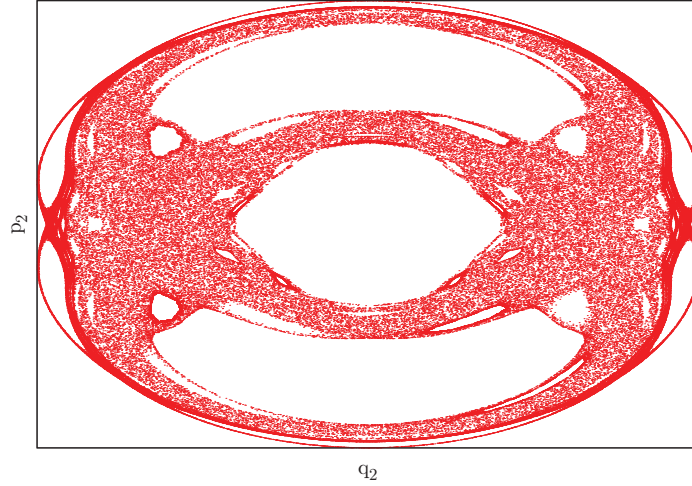


Figura 5.5: Pontos obtidos usando a técnica da seção de Poincaré para o sistema de YMH no caso em que $\kappa = 0,49749843$.

A Fig. 5.5 é obtida com $\kappa = 0,49749843$. Ela mostra que é para esse valor que o comportamento do sistema diverge consideravelmente do de um sistema integrável e os primeiros sinais de ergodicidade começam a aparecer. Esse é um valor mais preciso para o parâmetro crítico κ_c do que o fornecido por Matinyan e colaboradores. Atribuímos a diferença significativa entre o nosso resultado e o da Ref. [38] à maior precisão dos nossos cálculos numéricos.

Para garantir uma maior confiabilidade de uma abordagem mecânico-estatística, deveremos considerar situações em que os pontos obtidos com a técnica da seção de Poincaré cobrem uniformemente uma região do plano $q_2 - p_2$. A Fig. 5.6 mostra uma tal situação; o valor do parâmetro é $\kappa = 0,05$. Para uma maior clareza na discussão dos nossos resultados, daqui em diante sempre usaremos esse valor de κ , para o qual o sistema (5.48) é ergódico no sentido definido neste trabalho. Note que esse é o mesmo valor usado acima no nosso cálculo do EML, de maneira que a ergodicidade do sistema deve ter relação com a sua caoticidade.

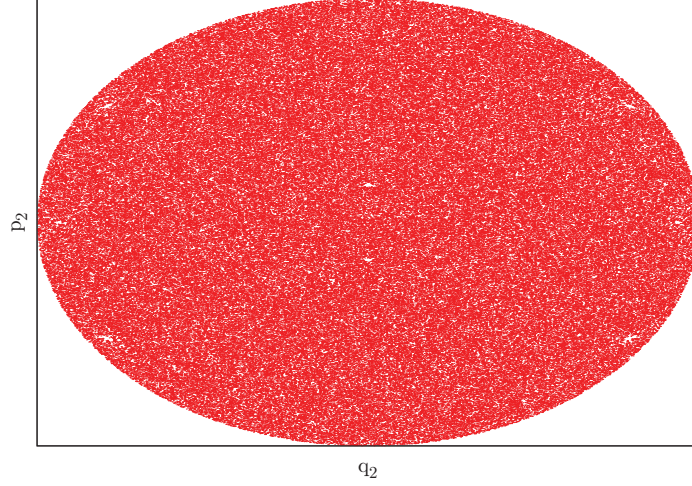


Figura 5.6: Pontos obtidos usando a técnica da seção de Poincaré para o sistema de YMH no caso em que $\kappa = 0,05$.

Volumes no Espaço de Fase

Gostaríamos de fazer a análise da MEC de equilíbrio termodinâmico do sistema (5.48) de acordo com as prescrições de Berdichevsky. O primeiro passo é calcular o volume $\Gamma(E)$ encerrado pela superfície de energia $H = E$ e mostrar que, para energias finitas, o resultado desse cálculo é finito. Do contrário, não é possível seguir com a análise que queremos fazer.

Ao contrário do que acontece no caso da Hamiltoniana H_{FS} , Eq. (4.90), a integral (3.5) não diverge no caso que estamos considerando:

$$\Gamma(E) = \frac{1}{h^2} \int_{H \leq E} dq_1 dq_2 dp_1 dp_2 = \frac{4\pi}{3h^2} \int_0^{2\sqrt{E}} dx \sqrt{\frac{(4E - x^2)^3}{2x^2 + 1}} \quad (5.51)$$

A integral (5.51) foi calculada numericamente para $h = 1$. A Fig. 5.7 mostra o resultado desse cálculo para valores da energia $H = E$ pertencentes ao intervalo $1,6667 \leq E \leq 10$, que corresponde a uma faixa de valores do parâmetro κ para os quais o comportamento do sistema é predominantemente ergódico. Como a figura mostra, o volume $\Gamma(E)$ é finito, de maneira que o sistema (5.48) está apto a ser estudado no contexto da MEC de Berdichevsky.

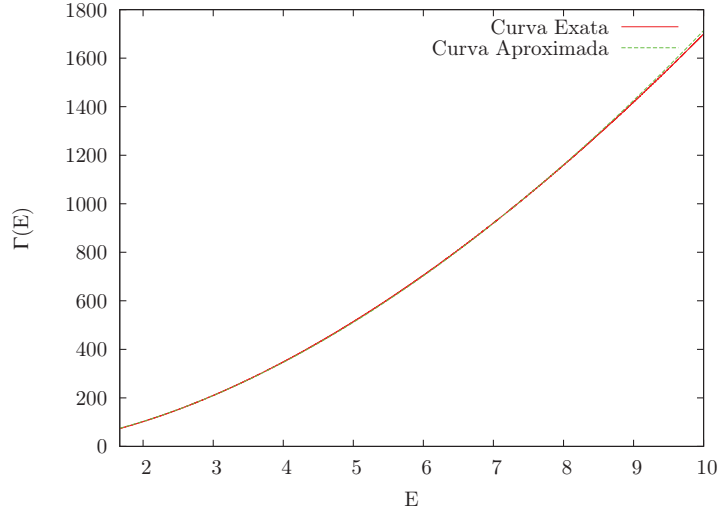


Figura 5.7: Volume $\Gamma(E)$ no espaço de fase encerrado pela superfície de energia $H = E$. Exibimos tanto o resultado da integração numérica da expressão na Eq. (5.51) quanto a nossa curva de ajuste, Eq. (5.52).

A integral na Eq. (5.51) não pode ser resolvida analiticamente. Apesar de precisarmos recorrer a métodos numéricos, achamos conveniente ter o volume (5.51) expresso numa forma analítica que melhor aproxima os nossos resultados computacionais. Fazemos a suposição de que o volume Γ tem uma dependência na energia E do tipo

$$\Gamma(E) = aE^b \quad (5.52)$$

onde a e b são coeficientes de ajuste. Para a faixa de energias considerada, determinamos que $a \approx 30,759$ ($[a] = L^b$) e $b \approx 1,746 = \frac{873}{500}$ (b adimensional). A nossa curva de ajuste pode ser comparada com a curva “exata” na Fig. 5.7.

Mecânica Estatística: Termalização

Em posse dos resultados acima, podemos estudar a termalização do sistema de YMH. A definição usual de temperatura (no equilíbrio termodinâmico) fornece o seguinte resultado:

$$T_u(E) = \frac{E}{b-1} \approx \frac{500}{373} E \quad (5.53)$$

A Fig. 5.8 mostra o resultado da determinação dinâmica da temperatura de acordo com a definição usual desta. O valor da energia utilizado nessa simulação é consistente com um valor de κ dado por $\kappa = 0,05$. Sendo assim, o valor teórico da temperatura é $T_u = 6,702$. Como pode ser visto na Fig. 5.8, a temperatura calcu-

lada dinamicamente converge para um dado valor. Este é dado por $T_{u,din} = 7,045$, de maneira que o resultado da determinação numérica difere ligeiramente do valor teórico. O erro percentual cometido é igual a 5,118%.

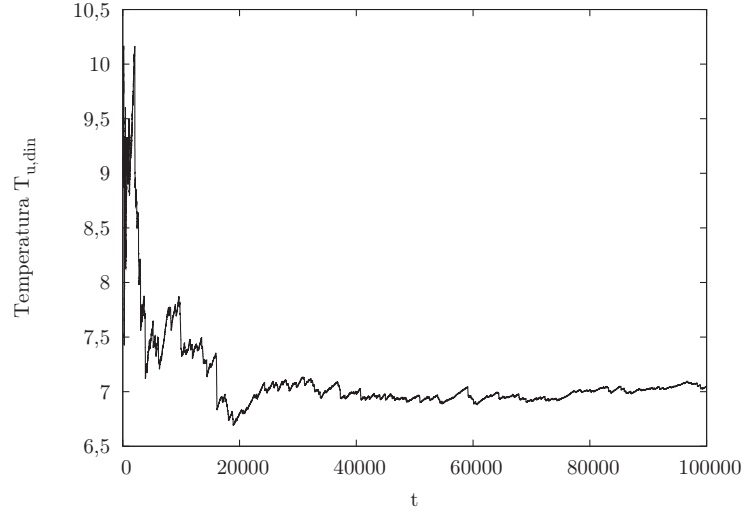


Figura 5.8: Resultados do cálculo dinâmico da temperatura de acordo com a definição usual.

Tentamos explicar esse erro considerável. O cálculo numérico dos coeficientes de ajuste a e b da Eq. (5.52) foi realizado com a precisão adequada. Isso significa que a nossa curva de ajuste, Eq. (5.52), é capaz de prever com um erro percentual pequeno o resultado da integração numérica da expressão dada na Eq. (5.51).

Além disso, a resolução numérica do SDH em questão foi feita com o auxílio de integradores simpléticos. Devido à alta eficiência do método de integração utilizado nessas simulações, é razoável supor que o erro atribuído ao algoritmo é pequeno. Uma maneira de tornar essa noção quantitativa é a seguinte: ao final de uma simulação, calculamos a energia e comparamos o valor obtido com aquele que essa grandeza tinha no instante inicial, ou seja, com o valor que fixamos diretamente no código do programa envolvido na simulação. Como o SDH em questão é autônomo e, portanto, conservativo, o desvio no valor da energia fornece uma medida do erro associado ao algoritmo. Para a simulação que deu origem à Fig. 5.8, por exemplo, o erro introduzido pelo integrador simplético é igual a $4,744 \times 10^{-7}\%$. Isso confirma que o algoritmo utilizado também fornece a precisão adequada.

Levando os fatos do parágrafo acima em consideração, é razoável supor que o erro

percentual encontrado nos cálculos da temperatura usual tem relação com a forma complexa da função Φ . Nesse caso, complexidade significa um número grande de operações matemáticas que o computador precisa realizar para determinar Φ . Cada operação introduz um erro, pois o seu resultado não é determinado exatamente, uma vez que o computador só é capaz de armazenar uma quantidade finita dos dígitos de um número. A precisão que um computador pode oferecer é, em geral, aceitável, mas sempre existe um erro introduzido da maneira que acabamos de descrever. Quando o número de operações matemáticas realizadas é grande, no entanto, o erro total cometido (isto é, o erro devido à totalidade das operações) pode ser considerável. Afirmamos que isso pode explicar a ligeira diferença entre os valores teóricos e os das simulações observada nos nossos estudos numéricos da temperatura do sistema de YMH de acordo com a definição usual dessa grandeza. Conclui-se, portanto, que a temperatura usual também não é a escolha ideal para uma análise computacional.

Também consideramos os cálculos de temperatura de acordo com a definição de Berdichevsky. A previsão analítica para essa grandeza no equilíbrio termodinâmico é

$$T_B(E) = \frac{1}{b}E \approx \frac{500}{873}E \quad (5.54)$$

Da mesma forma que fizemos para a temperatura de acordo com a definição usual, apresentamos os resultados numéricos dos cálculos das temperaturas dinâmicas no presente caso. A Fig. 5.9 mostra o resultado da determinação dinâmica da temperatura de acordo com a definição de Berdichevsky desta. Mais uma vez, o valor da energia utilizado é consistente com um valor de κ dado por $\kappa = 0,05$. Neste caso, portanto, o valor previsto analiticamente para a temperatura é $T_B = 2,864$.

Como a definição de Berdichevsky é consistente com um teorema de equipartição da energia, calculamos aqui duas temperaturas dinâmicas. Uma delas está associada com a média temporal do quadrado do *momentum* p_1 ; a outra é definida de maneira análoga, mas em termos do *momentum* p_2 . Como pode ser visto na Fig. 5.9, cada uma das temperaturas calculadas dinamicamente converge para um dado valor. Esses valores são dados por $T_{B,din}^{(1)} = 2,889$ e $T_{B,din}^{(2)} = 2,858$, onde o índice superior indica a componente do *momentum* correspondente. Dessa maneira, os resultados da determinação numérica diferem ligeiramente do valor teórico. Os respectivos erros percentuais são iguais a 0,891% e 0,191%. Observe que esses valores são menores do que aquele obtido com a definição usual de temperatura. Isso reforça a nossa afirmação de que trabalhar com a temperatura de acordo com a prescrição usual

não é a melhor escolha do ponto de vista computacional.

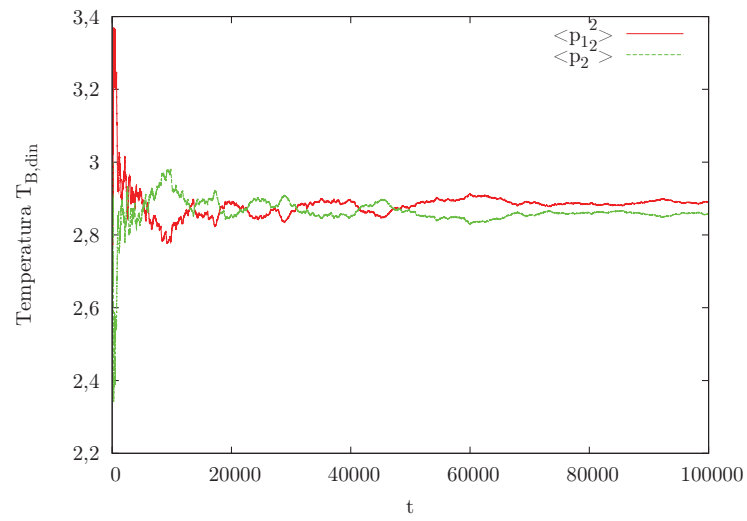


Figura 5.9: Resultados do cálculo dinâmico da temperatura de acordo com a definição de Berdichevsky.

Capítulo 6

Conclusão e Perspectivas Futuras

Neste trabalho, discutimos uma característica bastante importante das teorias de *gauge* não-Abelianas, a não-linearidade das respectivas equações de campo clássicas. Utilizando a suposição de que as variáveis de campo só dependem do tempo de acordo com observadores num certo referencial de Minkowski e analisando configurações de campo simples, mostramos que essa não-linearidade pode se manifestar através da evolução caótica do sistema físico correspondente. Essa análise foi feita tanto no contexto da teoria de YM na ausência de fontes de campo quanto no da teoria de YMH, que, além do campo de *gauge* $SU(2)$, envolve um par de campos escalares complexos. Para realizar esses estudos, foi necessário o emprego de métodos numéricos. Introduzimos e fizemos uso de integradores simpléticos para determinar numericamente a evolução dos sistemas físicos considerados. Para caracterizar as soluções numéricas como caóticas, calculamos o EML e mostramos que este é positivo. Apesar de não termos demonstrado esse resultado no contexto da QCD, a semelhança formal entre essa teoria e a de YM nos leva a especular que também pode haver caos na QCD.

A possibilidade de observarmos comportamento caótico em teorias de *gauge* não-Abelianas nos motivou a considerar um estudo mecânico-estatístico de SDHs com espaços de fase de baixa dimensionalidade derivados de tais teorias. Como discutimos, o caos na dinâmica de SDHs com poucos graus de liberdade pode dar origem a um comportamento ergódico por parte desses sistemas, o que justifica uma análise destes baseada nos princípios da MEC. Para verificar se um dado sistema apresentava uma dinâmica ergódica, explicamos e utilizamos a técnica da seção de Poincaré. Esta nos permitiu representar graficamente uma certa região do espaço de fase fisicamente acessível ao sistema, de maneira que obtivemos um critério visual para dizer se ele acessa todos (ou grande parte) dos estados físicos nessa região. Esse é o critério utilizado neste trabalho para definir os sistemas como ergódicos.

Devido ao fato de que os SDHs considerados por nós possuem poucos graus de liberdade, os nossos estudos da MEC estavam baseados na formulação de Berdichevsky dessa teoria. Essa extensão da MEC usual foi considerada por Berdichevsky, pois a ergodicidade é o ingrediente dinâmico que garante a validade de uma abordagem estatística à análise de SDHs e, não, um número grande de graus de liberdade.

Em seguida, realizamos o estudo dinâmico da termalização na teoria de YMH. No contexto da MEC de sistemas de baixa dimensionalidade, duas definições de temperatura foram consideradas. Uma delas corresponde à definição usual dessa grandeza na MEC de sistemas com muitos graus de liberdade. A outra é consistente com as ideias de Berdichevsky e com a validade de um teorema de equipartição da energia. Os valores de temperatura no equilíbrio termodinâmico de acordo com as duas definições foram determinados analiticamente. Além disso, foi feito um cálculo numérico das temperaturas dinâmicas correspondentes do sistema de YMH fora do equilíbrio. Mostramos através de simulações que estas convergem para os respectivos valores teóricos no equilíbrio, de maneira que a transição de uma descrição dinâmica para uma termodinâmica pôde ser observada. O sucesso da abordagem utilizada pode ser quantificado através dos valores aceitáveis para os erros percentuais encontrados nos cálculos numéricos das temperaturas de equilíbrio.

Com este trabalho, mostramos que o estudo da termalização do sistema de YMH pode ser feito com o auxílio da formulação de Berdichevsky da MEC. No entanto, motivamos a análise da termalização caótica em teorias de *gauge* não-Abelianas falando sobre o QGP. O que devemos fazer na sequência deste trabalho é lidar com modelos dinâmicos para esse sistema. Mantendo a estratégia de analisar sistemas com simetria $SU(3)$ através das suas contrapartes com simetria $SU(2)$, os modelos para o QGP estão baseados nas chamadas *equações de Wong* [39]. Estas descrevem classicamente uma partícula puntiforme que carrega *isospin* e interage com o campo de *gauge* $SU(2)$. Uma tal partícula representa o equivalente de um quark; o campo de YM modela o comportamento do campo dos glúons.

A dificuldade em trabalhar com modelos baseados nas equações de Wong é devida ao fato de que nesses casos também existe uma dinâmica associada às cargas não-Abelianas dos “quarks”. Além de termos um número maior de equações diferenciais para resolver numericamente, isso também introduz uma séria complicação teórica:

os sistemas dinâmicos derivados a partir das equações de Wong não possuem uma estrutura Hamiltoniana [34]. Uma consequência desse fato é que, como não existe uma função de Hamilton a partir da qual as equações de movimento podem ser deduzidas, também não há a noção de uma superfície de energia para esse tipo de sistema dinâmico. Como o volume das regiões encerradas pelas superfícies de energia é a quantidade fundamental da MEC de Berdichevsky, sistemas clássicos que envolvem cargas não-Abelianas não podem ser estudados no contexto dessa teoria.

A inexistência de uma estrutura Hamiltoniana nos modelos baseados nas equações de Wong reflete o fato de que a álgebra das cargas não-Abelianas — quando encaradas como variáveis canônicas — não é a mesma álgebra de parênteses de Poisson das variáveis associadas ao campo de *gauge* $SU(2)$. Em termos mais simples, isso significa que as cargas não podem ser vistas como coordenadas generalizadas de um certo SDH. Suspeitamos, no entanto, que a MEC de sistemas dinâmicos com cargas não-Abelianas pode ser estudada se considerarmos que estes podem possuir uma estrutura mais geral do que a Hamiltoniana. Essa possibilidade pode ser considerada, pois certas propriedades do formalismo Hamiltoniano da Mecânica Clássica não dependem da forma explícita do parênteses de Poisson com a qual as equações de Hamilton são consistentes. Sem perder essas características do formalismo, podemos considerar definições do parênteses de Poisson mais gerais do que a usual, Eq. (2.4), desde que elas possuam as mesmas propriedades que o parênteses tem de acordo com esta. Exemplos de tais propriedades são a anti-simetria do parênteses de Poisson e a validade da chamada relação de Jacobi. Diz-se que sistemas dinâmicos cujas equações de movimento são consistentes com uma definição mais geral do parênteses de Poisson têm *estrutura de Poisson* [18]. Possivelmente, seremos obrigados a considerar uma forma mais complexa para o parênteses de Poisson se quisermos superar a dificuldade discutida no início do presente parágrafo. Estruturas de Poisson podem ser necessárias para tratar as variáveis dinâmicas em pé de igualdade nos modelos para o QGP baseados nas equações de Wong [40].

Se a possibilidade discutida acima se concretizar, podemos investigar ainda a questão do estudo numérico de sistemas dinâmicos com estrutura de Poisson. Da mesma maneira que fizemos na Seção 2.2 para sistemas com estrutura Hamiltoniana, é possível utilizar o fato de que um sistema possui estrutura de Poisson para construir um algoritmo de integração numérica mais eficiente para ele. Esse tipo de algoritmo recebe o nome de *integrador de Poisson* [41].

Referências Bibliográficas

- [1] V. Berdichevsky, “The Connection Between Thermodynamic Entropy and Probability,” J. Appl. Math. Mech. **52**, 738 (1988).
- [2] V. M. Bannur, P. K. Kaw, and J. C. Parikh, “Statistical Mechanics of Quartic Oscillators,” Phys. Rev. E **55**, 2525 (1997).
- [3] S. Yan, Q. Wang, and S. Liu, “Towards a Dynamical Temperature of Finite Hamiltonian Systems,” Physica A **388**, 4943 (2009).
- [4] W. Greiner, L. Neise, and H. Stöcker, *Thermodynamics and Statistical Mechanics* (Springer, 1997).
- [5] K. Huang, *Statistical Mechanics* (Wiley, 1987).
- [6] T. Muta, *Foundations of Quantum Chromodynamics* (World Scientific, 1998).
- [7] V. M. Bannur, “Statistical Mechanics of Yang-Mills Classical Mechanics,” Phys. Rev. C **72**, 024904 (2005).
- [8] J. Letessier and J. Rafelski, *Hadrons and Quark-Gluon Plasma* (Cambridge University Press, 2002).
- [9] F. F. Chen, *Introduction to Plasma Physics and Controlled Fusion* (Springer, 1984), Vol. 1.
- [10] S. Coleman, *Aspects of Symmetry* (Cambridge University Press, 1988).
- [11] H. Goldstein, C. P. Poole, and J. L. Safko, *Classical Mechanics* (Addison Wesley, 2001).
- [12] E. Forest and R. D. Ruth, “Fourth-Order Symplectic Integration,” Physica D **43**, 105 (1990).
- [13] H. Yoshida, “Construction of Higher Order Symplectic Integrators,” Phys. Lett. A **150**, 262 (1990).

- [14] B. Leimkuhler and S. Reich, *Simulating Hamiltonian Dynamics* (Cambridge University Press, 2005).
- [15] M. Tabor, *Chaos and Integrability in Nonlinear Dynamics: An Introduction* (Wiley-Interscience, 1989).
- [16] G. Benettin, L. Galgani, and J. Strelcyn, “Kolmogorov Entropy and Numerical Experiments,” *Phys. Rev. A* **14**, 2338 (1976).
- [17] G. K. Savvidy, “Classical and Quantum Mechanics of Non-Abelian Gauge Fields,” *Nucl. Phys. B* **246**, 302 (1984).
- [18] M. Dunajski, *Solitons, Instantons, and Twistors* (Oxford University Press, 2010).
- [19] M. Hénon and C. Heiles, “The Applicability of the Third Integral of Motion: Some Numerical Experiments,” *Astron. J.* **69**, 73 (1964).
- [20] V. L. Berdichevsky and M. v. Alberti, “Statistical Mechanics of Hénon-Heiles Oscillators,” *Phys. Rev. A* **44**, 858 (1991).
- [21] H. H. Rugh, “Dynamical Approach to Temperature,” *Phys. Rev. Lett.* **78**, 772 (1997).
- [22] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Mechanics* (Butterworth-Heinemann, 1976).
- [23] W. Heisenberg, “Über den Bau der Atomkerne I,” *Zeitschrift für Physik* **77**, 1 (1932).
- [24] G. Breit, E. U. Condon, and R. D. Present, “Theory of Scattering of Protons by Protons,” *Phys. Rev.* **50**, 825 (1936).
- [25] B. Cassen and E. U. Condon, “On Nuclear Forces,” *Phys. Rev.* **50**, 846 (1936).
- [26] M. Kaku, *Quantum Field Theory: A Modern Introduction* (Oxford University Press, 1993).
- [27] F. Ajzenberg and T. Lauritsen, “Energy Levels of Light Nuclei V,” *Rev. Mod. Phys.* **27**, 77 (1955).
- [28] C. N. Yang and R. L. Mills, “Conservation of Isotopic Spin and Isotopic Gauge Invariance,” *Phys. Rev.* **96**, 191 (1954).

- [29] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë, *Quantum Mechanics* (Wiley-Interscience, 2006), Vol. 2.
- [30] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics* (Wiley, 1998).
- [31] D. Griffiths, *Introduction to Elementary Particles* (Wiley, 1987).
- [32] T. S. Biró, S. G. Matinyan, and B. Müller, *Chaos and Gauge Field Theory* (World Scientific, 1995).
- [33] S. G. Matinyan, G. K. Savvidi, and N. G. Ter-Arutyunyan-Savvidi, “Classical Yang-Mills Mechanics. Nonlinear Color Oscillations,” *Sov. Phys. JETP* **53**, 421 (1981).
- [34] V. M. Bannur, “Fully Nonlinear Excitations of Non-Abelian Plasmas,” *Phys. Rev. C* **76**, 024913 (2007).
- [35] H. M. Asatryan and G. K. Savvidy, “Configuration Manifold of Yang-Mills Classical Mechanics,” *Phys. Lett. A* **99**, 290 (1983).
- [36] T. Cheng and L. Li, *Gauge Theory of Elementary Particle Physics* (Oxford University Press, 1988).
- [37] F. Mandl and G. Shaw, *Quantum Field Theory* (John Wiley & Sons, 1984).
- [38] S. G. Matinyan, G. K. Savvidi, and N. G. Ter-Arutyunyan-Savvidi, “Stochasticity of Classical Yang-Mills Mechanics and Its Elimination by Using the Higgs Mechanism,” *JETP Lett.* **34**, 590 (1981).
- [39] S. K. Wong, “Field and Particle Equations for the Classical Yang-Mills Field and Particles with Isotopic Spin,” *Nuovo Cimento A* **65**, 689 (1970).
- [40] M. Woitek and G. Krein, in preparation (unpublished).
- [41] B. Karasözen, “Poisson Integrators,” *Mathematical and Computer Modelling* **40**, 1225 (2004).