UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS

Leandro Alex Moreira Viscardi

Férmions em QCD na rede

São Carlos

2019

Leandro Alex Moreira Viscardi

Férmions em QCD na rede

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo, para obtenção do título de Mestre em Ciências.

Área de concentração: Física Básica

Orientadora: Profa. Dra. Tereza Cristina da Rocha Mendes

Versão corrigida
(Versão original disponível na Unidade que aloja o Programa)

São Carlos
2019

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Viscardi, Leandro Alex Moreira
Férmions em QCD na rede / Leandro Alex Moreira Viscardi; orientadora Tereza Cristina da Rocha Mendes - versão corrigida -- São Carlos, 2019.
138 p.

Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-Graduação em Física Básica) -- Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, 2019.

1. QCD. 2. Teoria na rede. 3. Férmions de Wilson. 4. Aproximação Quenched. 5. Espectro de hádrons. I. Mendes, Tereza Cristina da Rocha, orient. II. Título.

Este trabalho é dedicado ao meu tio Carlos.

AGRADECIMENTOS

Inicio agradecendo à CAPES e ao CNPq pelo apoio financeiro.

Ao Instituto de Física de São Carlos por todo o ensino. A todos os professores que contribuíram para minha formação e funcionários que tornam o IFSC um lugar de excelência para se estudar.

Aos meus amigos do grupo de pesquisa. Em particular, à minha orientadora Tereza Cristina da Rocha Mendes que tem me dado oportunidade de trabalhar com ela desde a época de graduação, quando realizei uma iniciação científica que serviu como um incentivo para o desenvolvimento deste projeto. Ao Nelson Pitanga Lachini que me ajudou bastante com a elaboração dos algoritmos e execução das simulações. E ao Willian Matioli Serenone que também me ajudou com ideias que foram aplicadas no desenvolvimento de certos algoritmos.

A todos os meus amigos da USP campus de São Carlos e do alojamento. Em especial Felipe Ceregatti, Luiz Gabriel, Matheus Pereira, Eduardo Cherobin, Gabriel dos Santos, Everton Silva e Vitor Stroka que foram os mais presentes desde o inicio da minha graduação.

À minha amiga e namorada Franciana Sousa por tornar meus dias mais leves e felizes.

E, por último, quero agradecer infinitamente à minha família que é a razão da minha vida, meu orgulho e minha base.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

"Ninguém nunca descobre sobre o que é a vida, e isso não importa. Explore o mundo. Quase tudo é bastante interessante se você entrar com profundidade o suficiente. "

Richard P. Feynman

RESUMO

VISCARDI, L. A. M. **Férmions em QCD na rede**. 2019. 138p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2019.

O presente trabalho propõe o estudo da cromodinâmica quântica (QCD) através de simulações numéricas da teoria na rede. Inicialmente será apresentada a formulação de integral de trajetória da mecânica quântica para em seguida generalizar os resultados para a teoria quântica de campos. A teoria na rede exigirá a discretização do espaço-tempo e mostraremos como colocar os graus de liberdade bosônicos e fermiônicos na rede. Usaremos a formulação de Wilson para a ação de glúons e férmions na rede. Simulações numéricas em QCD na rede envolvendo férmions são consideravelmente complicadas e têm um custo computacional altamente limitante. Mais precisamente, não é possível simular a estrutura do vácuo fermiônico sem algum tipo de aproximação. Neste trabalho usaremos a aproximação quenched da QCD, que consiste em negligenciar os efeitos de loops de quarks do vácuo. Também empregaremos apenas dois sabores de quarks degenerados, correspondendo às duas espécies de quarks leves presentes na teoria. Ao longo deste trabalho serão exploradas as dificuldades encontradas em colocar quarks na rede e também será determinado o espectro de hádrons como uma aplicação de interesse. Contudo, também estudaremos um problema simples envolvendo a teoria de gauge pura na rede, isto é, calcularemos o valor esperado para o operador plaqueta. Este estudo servirá como um pré aquecimento antes de lidar com o problema mais desafiador do espectro de hádrons e também permitirá aprender algumas técnicas de simulação que serão utilizadas na determinação do espectro de hádrons, a saber, o método de Monte Carlo e os algoritmos banho térmico e sobre-relaxação, que servem para construir configurações de gauge (glúons). A interpretação dos resultados obtidos deverá ser realizada a partir da análise estatística dos dados. Estimaremos o tempo de termalização do operador plaqueta a partir da visualização da equilibração do resultado e usaremos o método bloco de dados para estimar o tempo de correlação das configurações de gauge. Essas estimativas serão importantes para decidirmos os parâmetros de simulação adequados para o espectro de hádrons, pois neste caso não teremos acesso à quantidade suficiente de dados para determinar o valor desses parâmetros. Para a determinação de erros estatísticos será usado o método de jackknife. O cálculo do espectro de hádrons envolve a inversão de uma matriz esparsa não positiva definida, mais precisamente, o operador de Dirac. Esta será a parte que mais consumirá tempo nas simulações e usaremos o algoritmo gradiente biconjugado estabilizado (Bi-CGStab) para a inversão. A determinação da massa de hádrons somente será possível após a fixação da massa experimental de algum hádron (usaremos o píon), e após a extrapolação quiral dos resultados, que será realizada a partir

do método dos mínimos quadrados não linear. Ao final deste trabalho obteremos uma estimava para a massa do próton e do méson rho.

Palavras-chave: QCD. Teoria na rede. Férmions de Wilson. Aproximação Quenched. Espectro de hádrons.

ABSTRACT

VISCARDI, L. A. M. **Fermions in lattice QCD**. 2019. 138p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2019.

This work proposes the study of quantum cromodynamics (QCD) through numerical simulations of the lattice theory. Initially we will present the path integral formulation of quantum mechanics and then generalize these results to quantum field theory. The lattice theory requires the discretization of space-time and we will show how to put the fermionic and gluonic degrees of freedom on the lattice. We will use Wilson's formulation for the action of fermions and gluons. Numerical simulations in lattice QCD with fermions are considerably complicated and their cost is highly limiting. More precisely, it is not possible to simulate the fermionic structure of the vacuum without any kind of approximation. We will use the quenched approximation in this work, which consists of neglecting the effects of vacuum quark loops. We also will employ only two flavors of degenerate quarks corresponding to the two species of light quarks present in the theory. Throughout the work we will discuss the difficulties related to putting quarks on the lattice and we will evaluate the hadron spectrum as an application of interest. However, we also must study a simple problem involving the lattice pure-gauge theory, i.e., we will compute the mean value of the plaquette operator. This will be a warm-up study before dealing with the more challenging problem of the hadron spectrum and will allow us to learn some simulation techniques that will be used in the hadron spectrum determination, namely the Monte Carlo method and the heat bath and overrelaxation algorithms, which are useful to build gauge configurations (i.e. gluon configurations). The interpretation of the results obtained should be performed using statistical analysis of the data. We will estimate the thermalization time of the plaquette operator from the visualization of the equilibration result and will estimate the correlation time of gauge configurations using the data blocking method. These estimates are important to decide the suitable simulation parameters for the hadron spectrum, because in that case we will not have access to a quantity of data large enough to determine the value of these parameters. For the statistical error determination we will use the jackknife method. The calculation of the hadron spectrum involves the inversion of a non positive definite sparse matrix, more precisely, the Dirac operator. This will be the most time-consuming step of the simulation and we will use the Bi-Conjugate Gradient Stabilized (Bi-CGRStab) algorithm to do the inversion. The determination of hadron masses will only be possible after fixing an experimental mass of some hadron (we will use the pion), and after the quiral extrapolation of the results, which will be performed using the non-linear least square method. At the end of this work we will obtain an estimate of the mass of the proton and of the rho meson.

Keywords: QCD. Lattice theory. Wilson fermions. Quenched approximation. Hadron spectrum.

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO . . . 17

2 INTEGRAL DE TRAJETÓRIA EM MECÂNICA QUÂNTICA NÃO RELATIVÍSTICA . . . 21

2.1 Integral de Trajetória Unidimensional . . . 21

2.2 Integral de Trajetória Multidimensional . . . 28

2.3 Funções de n pontos . . . 29

3 INTEGRAL DE TRAJETÓRIA EM TEORIA QUÂNTICA DE CAMPOS . . . 35

3.1 Integral de Trajetória para Campos Bosônicos . . . 35

3.2 Integral de Trajetória para Campos Fermiônicos . . . 37

3.2.1 Funções de Correlação Fermiônicas . . . 38

3.2.2 Álgebra de Grassmann . . . 41

3.2.2.1 Números de Grassmann e Derivadas . . . 41

3.2.2.2 Integração de Grassmann . . . 43

4 FÉRMION LIVRE NA REDE . . . 49

4.1 Discretização Ingênua de Férmions . . . 49

4.2 O Problema dos Dublês de Férmions . . . 51

4.3 Férmions de Wilson . . . 53

4.4 Simetria Quiral . . . 55

4.4.1 Simetria Quiral no Continuo . . . 55

4.4.2 Simetria Quiral na Rede . . . 57

5 QCD NA REDE . . . 59

5.1 Quarks e Glúons . . . 59

5.2 Parte Fermiônica da Ação da QCD . . . 60

5.2.1 Invariância de Gauge da Ação Fermiônica . . . 60

5.3 Parte Gluônica da Ação da QCD . . . 62

5.4 Quarks na Rede . . . 64

5.4.1 Introdução de Campos de Gauge como Variáveis de Ligação . . . 65

5.4.2 Relação entre Variáveis de Ligação e Campos de Gauge . . . 66

5.4.3 Férmions de Wilson em QCD na Rede . . . 68

5.5 Glúons na Rede . . . 69

5.5.1 Objetos Invariantes por Transformações de Gauge . . . 69

5.5.2 Ação de Glúons na Rede . . . 70

5.6 Funções de Correlação para a QCD . . . 72

6 SIMULAÇÃO NUMÉRICA . . . 75
6.1 Loops de Wilson . . . 76
6.2 Método de Monte Carlo . . . 77
6.3 Construção de Configurações de Gauge . . . 78
6.3.1 Algoritmo de Metropolis . . . 79
6.3.2 Representações de Elementos de Grupos . . . 82
6.3.3 Candidato para a Atualização de Metropolis . . . 83
6.3.4 Pseudo Banho Térmico . . . 84
6.3.5 Transformando o Problema de SU(3) para SU(2) . . . 85
6.3.6 Algoritmo de Banho Térmico para Elementos SU(2) . . . 87
6.3.7 Sobre-relaxação . . . 88
6.4 Valor Esperado do Operador Plaqueta . . . 89
6.5 Detalhes de Simulação . . . 92
6.6 Análise de Dados . . . 93
6.6.1 Parâmetros de Simulação . . . 93
6.6.2 Autocorrelação . . . 94
6.6.3 Método do Bloco de Dados . . . 96
6.6.4 Jackknife . . . 98

7 ESPECTROSCOPIA DE HÁDRONS . . . 101
7.1 Interpoladores . . . 102
7.2 Correlator . . . 104
7.2.1 Correlatores de Interesse . . . 106
7.3 Aproximação Quenched . . . 108
7.4 Inversão do Operador de Dirac . . . 109
7.5 Discussão de Simulação . . . 111
7.5.1 Extrapolação de Dados . . . 111
7.5.2 Determinação de Massa . . . 112
7.5.3 Determinação de Erros . . . 114
7.6 Resultados . . . 115

8 CONCLUSÃO . . . 121

REFERÊNCIAS . . . 125

APÊNDICE A – MATRIZES GAMA . . . 129

APÊNDICE B – TRANSFORMADA DE FOURIER DA REDE . . . 131

APÊNDICE C – GRUPOS DE LIE SU(N) 133

APÊNDICE D – MEDIDA DE HAAR 137

1 INTRODUÇÃO

A Cromodinâmica Quântica (QCD) é a teoria fundamental que descreve a dinâmica de interações fortes entre quarks e glúons. Ela é uma teoria quântica de campos com simetria local de gauge SU(3), correspondendo aos três graus de liberdade da chamada *carga de cor*, responsável pela força forte. Os campos de férmions estão associados aos quarks, e os campos de gauge, tomados na representação adjunta do grupo de gauge, correspondem aos glúons. O primeiro reconhecimento da QCD foi devido à teoria de perturbação, que nos permite descrever processos hadrônicos de alta energia. A análise perturbativa é possível porque a teoria tem a característica notável chamada *liberdade assintótica*, que determina que o acoplamento (dinâmico) se torna pequeno quando a magnitude da transferência de momento nos processos hadrônicos se torna grande.[1]

Contudo, a abordagem convencional perturbativa falha na região de baixas energias, para momentos $p \lesssim 1$ Gev, onde a constante de acoplamento se torna da ordem da unidade. Nessa região, uma variedade de fenômenos não-perturbativos ocorrem, sendo um deles o notável fenômeno de *confinamento de quarks*. Existem vários modelos inspirados pela QCD para descrever o regime não-perturbativo da teoria, contudo nenhum deles tem sucesso em calcular grandezas físicas a partir de primeiros princípios da QCD sem aproximações.

A formulação proposta por Wilson fornece uma abordagem única e muito promissora para estudar o regime não-perturbativo da QCD.[2,3] A teoria na rede tem a vantagem teórica de uma formulação matematicamente precisa da QCD, em termos de grandezas finitas, dadas pelos graus de liberdade dos campos da teoria. Além disso, a formulação permite a utilização de ferramentas numéricas, tais como o método de Monte Carlo, para calcular grandezas físicas diretamente da QCD. De fato, a teoria na rede tem uma característica valiosa que possibilita um programa simples de renormalização da teoria quântica de campos. A rede atua como um regularizador da teoria. O comprimento de onda mais curto que pode ser modelado na rede é $\lambda_{\min} = 2a$, onde a é o espaçamento da rede. Os graus de liberdade com momento maior que π/a são excluídos da teoria na rede e, deste modo, a rede funciona como um corte ultravioleta. O programa de renormalização na rede é implementado a partir da conexão entre uma grandeza física e sua correspondente expressão na formulação de rede, de forma que seja removido o corte a, i.e. o *limite do contínuo* $a \to 0$ é tomado relacionando-se uma grandeza de rede a sua expressão física. É importante mencionar que a formulação de Wilson preserva a simetria de gauge exatamente, mesmo para a finito.

Em 1979, Creutz calculou pela primeira vez a tensão de corda usando o método de Monte Carlo e demonstrou o comportamento de escala aproximado da tensão de corda, que implica a coexistência de confinamento de quarks e liberdade assintótica.[4] Este resultado

encorajou a realização de outras simulações de QCD na rede a fim de calcular grandezas físicas da QCD. De fato, muitos trabalhos utilizando simulações numéricas de QCD na rede têm sido realizados desde os anos 1980, mostrando gradualmente que os métodos numéricos formam uma ferramenta poderosa e prática para estudo das propriedades não-perturbativas da QCD.

Dentre os diversos assuntos abordados pela teoria na rede da QCD, a determinação do espectro de hádrons seria uma demonstração valiosa da validade da QCD em baixas energias, isto é, no domínio não-perturbativo. Outra característica importante dos cálculos do espectro é que eles levam à determinação da massa dos quarks, que são parâmetros fundamentais do modelo padrão. Além disso, cada cálculo (ou "medida") realizado com sucesso pela teoria na rede fornece uma confiança a mais para a aplicação desta na determinação de outros observáveis físicos.

A primeira tentativa para a determinação do espectro de hádrons foi realizada em 1981.[5,6] Embora a formulação de QCD na rede forneça um caminho direto para calcular o espectro de hádrons, ela também sofre de severas restrições computacionais. Uma das restrições notáveis está relacionada à estrutura dinâmica do vácuo de quarks. Não é possível realizar simulações numéricas que levem em conta toda a complexidade do vácuo fermiônico. As primeiras simulações numéricas para a determinação do espectro de hádrons empregaram a aproximação quenched da QCD, em que os efeitos de loops de quarks no vácuo são desprezados. Na realidade, a aproximação quenched ainda continua sendo amplamente utilizada em cálculos de grandezas físicas. A principal justificativa da aproximação quenched são os próprios resultados por ela obtida, que refletem bem os valores experimentais das grandezas físicas calculadas.

Outra característica importante nos cálculos do espectro de hádrons é que não é possível alcançar a pequena massa do quark *up* e quark *down* em simulações numéricas. Neste caso, os custos computacionais crescem consideravelmente no limite de suas massas físicas e os resultados também sofrem de grandes flutuações numéricas. Assim, em cálculos do espectro de hádrons é geralmente necessário extrapolar os resultados obtidos para quarks pesados para quarks com as massas físicas do quark up e quark down.

Previsões realísticas a partir de QCD na rede são obtidas no limite em que o tamanho da rede se torna infinito e o espaçamento da rede se torna zero, isto é, o limite do contínuo do mundo físico. Contudo, essas duas grandezas também influenciam muito o custo computacional das simulações numéricas. Nos primeiros trabalhos de determinação do espectro de hádrons não era possível fazer um estudo detalhado desses dois limites e os cálculos eram restritos a redes pequenas. Por exemplo, na primeira estimativa do espectro de hádrons,[5] a maior rede utilizada foi $N_s^3 \times N_t = 6^3 \times 12$, onde N_s se refere ao tamanho da rede na dimensão espacial e N_t na dimensão temporal. Deste modo, os cálculos iniciais eram capazes apenas de fazer estimativas numéricas do espectro de hádrons e os

erros obtidos podiam ultrapassar 10% dos valores das massas calculadas. Além disso, não se tinham muitos dados para se fazer um controle preciso dos erros. Assim, os valores dos erros eram simples estimativas associadas basicamente às extrapolações dos dados. Felizmente, todo esse cenário foi melhorando à medida que novos recursos computacionais e novas técnicas de simulações foram se disponibilizando.

Com o uso de computação paralela, após apenas uma década da primeira estimativa do espectro de hádrons se tornou possível realizar simulações numéricas com redes alcançando o tamanho de até $32^2 \times 30 \times 40$ e também estudar os erros devidos a tamanhos finitos nas simulações.[7] Para esta finalidade, é preciso realizar várias simulações para diferentes parâmetros de rede e comparar seus resultados à medida que se aproxima o limite do contínuo. Em particular, nessa referência foi possível determinar o espectro de hádrons com desvios nas massas variando de 1 a 9% dependendo da partícula. Dentro do quadro da aproximação quenched essa é a ordem de precisão que se consegue obter em simulações numéricas. Apenas com a utilização de férmions dinâmicos é possível obter resultados que notavelmente concordam completamente com o resultado experimental.[8] Naturalmente, os cálculos de alta precisão em QCD na rede são possíveis graças às simulações de alto desempenho e às muitas técnicas desenvolvidas que permitem melhorar o sinal dos resultados e diminuir erros devidos a tamanhos finitos, etc. De fato, a QCD na rede é hoje uma ferramenta poderosa e indispensável para estudar as propriedades não-perturbativas da QCD.

A presente dissertação foi estruturada de forma sequencial e com alguns capítulos adicionais de apêndices que têm o objetivo de suplementar as ferramentas matemáticas básicas que são usadas em cálculos computacionais e em passos matemáticos no decorrer deste trabalho. A teoria na rede da QCD é construída a partir da formulação de integrais de trajetória em teorias quânticas de campos. Assim, no Capítulo 2 é feita uma revisão do método de integrais de trajetória em mecânica quântica não relativística e em seguida, no Capítulo 3, é realizada uma generalização direta desses resultados para o caso da teoria quântica de campos. Nessa parte da dissertação há também uma seção denominada álgebra de Grassmann, cujo objetivo é determinar as soluções analíticas para as integrais de trajetória de interesse para campos fermiônicos. Em seguida, no Capítulo 4 é estudado o caso mais simples de teoria quântica de campos na rede envolvendo campos fermiônicos, a saber, um férmion livre na rede. Começamos com a teoria no contínuo e fazemos uma descrição em detalhes da discretização do espaço-tempo e da ação no contínuo. Também mostramos que o limite do contínuo para campos fermiônicos na rede apresenta problemas, devidos aos chamados dublês de férmions, e apresentamos a solução aos dublês conhecida por férmions de Wilson. No Capítulo 5 é estudada a teoria da QCD na rede. Fazemos uma generalização dos férmions de Wilson, vistos no caso de férmions livres na rede, para o caso de quarks na rede. Também é descrita a formulação de Wilson para o caso da ação de glúons na rede. Após a construção da ação da QCD na rede, passamos para o

Capítulo 6, onde são descritas algumas técnicas empregadas em simulações numéricas de QCD na rede. A fim de avaliar essas técnicas, também realizamos o estudo do observável puramente de gauge mais simples possível, denominado "operador plaqueta". Também é descrito o tempo de simulação desse observável para depois ser comparado com o tempo de simulação para o observável mais simples possível envolvendo férmions na rede, a saber, o espectro de hádrons. No Capítulo 7 fazemos a determinação do espectro de hádrons. São usadas algumas técnicas computacionais descritas no capítulo anterior e são generalizados os parâmetros de simulações estimados para o operador plaqueta, para uso nas simulações do espectro de hádrons. No Capítulo 8 é apresentada a conclusão deste trabalho. No Apêndice A é descrita a representação quiral no espaço euclidiano das matrizes gama e suas principais propriedades. Sua representação é utilizada nas simulações numéricas do espectro de hádrons e as propriedades são usadas no decorrer desta dissertação em alguns passos matemáticos. No Apêndice B é descrita a transformada de Fourier da rede. Ela é usada para mostrar os dublês de férmions na Seção 4.2. No Apêndice C são descritas as principais propriedades dos grupos de Lie SU(N) e no Apêndice D as principais propriedades da medida de Haar, usadas para realizar integrações sobre as variáveis de ligação, isto é, as variáveis que descrevem os campos de glúons da QCD na rede.

2 INTEGRAL DE TRAJETÓRIA EM MECÂNICA QUÂNTICA NÃO RELATIVÍSTICA

A teoria na rede da QCD é construída a partir da formulação de integrais de trajetória da teoria quântica de campos. Assim, inicialmente deveremos estudar a construção da formulação de integrais de trajetória da mecânica quântica a partir de sua formulação canônica.[9] Em seguida, os resultados obtidos serão estendidos por analogia para a teoria quântica de campos. A determinação das integrais de trajetória em QCD na rede é dividida em duas partes. Primeiramente precisamos calcular as integrais para campos fermiônicos analiticamente e, assim, será necessário estudar a álgebra de Grassmann. Esse tópico será abordado na própria seção de integrais de trajetória para campos fermiônicos. O resultado da integral de campos fermiônicos pode depender de campos bosônicos; assim, ele deve ser integrado com as variáveis bosônicas. Nessa parte deverão ser empregadas as técnicas de simulações numéricas. Esse assunto será abordado apenas mais adiante, no Capítulo 6.

A construção da formulação de integrais de trajetória da mecânica quântica desenvolvida neste capítulo é baseada no livro texto de H.J. Rothe.[9] Por simplicidade, será realizada inicialmente a dedução da integral de trajetória para o caso unidimensional, para em seguida generalizar seus resultados para o caso multidimensional.

2.1 Integral de Trajetória Unidimensional

Na formulação hamiltoniana da mecânica clássica os estados do sistema são descritos por uma coordenada espacial q e a coordenada do momento canonicamente conjugada p. Já na formulação canônica da mecânica quântica os estados do sistema são descritos por vetores no espaço de Hilbert e os observáveis são representados por operadores hermitianos atuando neste espaço. Como os observáveis são representados por operadores, então as coordenadas $q \to Q$ e $p \to P$ passam a satisfazer uma relação de comutação, a saber*

$$[Q, P] = i\,. \tag{2.1}$$

Na representação de Schrödinger os autoestados dos operadores Q e P satisfazem a seguinte relação

$$Q|q\rangle = q|q\rangle\,, \tag{2.2a}$$

$$P|p\rangle = p|p\rangle\,. \tag{2.2b}$$

Os vetores de estado são normalizados em "funções delta de Dirac"

$$\langle q'|q\rangle = \delta(q' - q)\,, \tag{2.3a}$$

$$\langle p'|p\rangle = \delta(p' - p)\,, \tag{2.3b}$$

* Nesta dissertação serão usadas unidades naturais $\hbar = c = 1$.

e obedecem as relações de completeza

$$\int dq|q\rangle\langle q| = \mathbb{1}\,, \tag{2.4a}$$

$$\int dp|p\rangle\langle p| = \mathbb{1}\,. \tag{2.4b}$$

A representação do autoestado de momento no espaço de coordenadas é uma onda plana

$$\langle q|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ipq}\,. \tag{2.5}$$

Note que foi escolhido manter o fator $1/\sqrt{2\pi}$ na onda plana e manter a relação de completeza para o momento igual à unidade.

O estado quântico do sistema é descrito por um vetor $|\psi\rangle$ no espaço de Hilbert. Na representação de Schrödinger este estado depende do tempo e satisfaz a equação de movimento

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H(Q,P)|\psi(t)\rangle\,. \tag{2.6}$$

A solução desta equação é

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iH(t-t_0)}|\psi(t_0)\rangle\,, \tag{2.7}$$

e a correspondente função de onda na representação de coordenada é

$$\psi(q,t) = \langle q|\psi(t)\rangle\,. \tag{2.8}$$

A partir da equação (2.7) da evolução do sistema quântico, podemos obter

$$\begin{aligned}\psi(q',t') &= \langle q'|\psi(t')\rangle \\ &= \langle q'|e^{-iH(t'-t)}|\psi(t)\rangle \\ &= \int dq\,\langle q'|e^{-iH(t'-t)}|q\rangle\langle q|\psi(t)\rangle \\ &= \int dq\,G(q',t';q,t)\psi(q,t)\,,\end{aligned} \tag{2.9}$$

onde

$$G(q',t';q,t) = \langle q'|e^{-iH(t'-t)}|q\rangle = \langle q',t'|q,t\rangle \tag{2.10}$$

é a função de Green[†] descrevendo a propagação do estado $|\psi(t)\rangle$. Note que o conhecimento da função de Green é equivalente a ter resolvido a equação de Schrödinger (2.6), pois o desenvolvimento temporal da função de onda é obtido por meio de uma simples integração (2.9) da própria função de Green, levando de um estado dado até um outro desejado, e justificando, assim, o fato de considerarmos a função de Green como um propagador.

† Ela também é chamada de Kernel de Feynman.

Uma propriedade muito importante da função de Green (2.10) é que ela satisfaz a seguinte lei de composição

$$G(q',t';q,t) = \int dq'' G(q',t';q'',t'')G(q'',t'';q,t)\,. \tag{2.11}$$

Podemos ver isto notando que

$$\begin{aligned} \mathrm{e}^{-iH(t'-t)} &= e^{-iH(t'-t'')}e^{-iH(t''-t)} \\ &= \int dq'' e^{-iH(t'-t'')}|q''\rangle\langle q''|e^{-iH(t''-t)}\,, \end{aligned}$$

e agora colocando isto em (2.10) obtemos

$$\begin{aligned} G(q',t';q,t) &= \langle q'|e^{-iH(t'-t)}|q\rangle \\ &= \int dq''\langle q'|e^{-iH(t'-t'')}|q''\rangle\langle q''|e^{-iH(t''-t)}|q\rangle \\ &= \int dq'' G(q',t';q'',t'')G(q'',t'';q,t)\,, \end{aligned}$$

que é exatamente a equação (2.11).

Usando a lei de composição Feynman derivou a representação por integral de trajetória para o elemento de matriz (2.10). Assim, agora será derivada essa representação, porém para a versão euclidiana, que corresponde a realizar uma continuação analítica para tempos imaginários.

Então, começamos inicialmente considerando o elemento de matriz que descreve a função de Green

$$\langle q',t'|q,t\rangle = \langle q'|\mathrm{e}^{-iH(t'-t)}|q\rangle\,, \tag{2.12}$$

onde

$$|q,t\rangle = \mathrm{e}^{iHt}|q\rangle \tag{2.13}$$

é autoestado do operador de Heisenberg

$$Q(t) = \mathrm{e}^{iHt}Q\mathrm{e}^{-iHt}\,, \tag{2.14}$$

ou seja,

$$Q(t)|q,t\rangle = q|q,t\rangle\,. \tag{2.15}$$

A continuação para tempos imaginários da função de Green é obtida por meio da rotação de Wick

$$t \to -i\tau \quad \text{e} \quad t' \to -i\tau'\,. \tag{2.16}$$

Assim, a função de Green euclidiana é dada por

$$\langle q',t'|q,t\rangle_{\substack{t=-i\tau \\ t'=-i\tau'}} = \langle q'|\mathrm{e}^{-H(\tau'-\tau)}|q\rangle\,. \tag{2.17}$$

Para obtermos a representação por integral de trajetória da função de Green (2.17), devemos dividir o intervalo de tempo[‡] $[\tau, \tau']$ em N segmentos infinitesimais de comprimento $\epsilon = (\tau' - \tau)/N$. Denotemos por $\tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_{N-1}$ os tempos intermediários, isto é, $\tau < \tau_1 < \tau_2 < \ldots < \tau_{N-1} < \tau'$. Então a função de Green euclidiana pode ser obtida por uma sequência de intervalos de tempo infinitesimais como segue

$$\begin{aligned}
\langle q'|\mathrm{e}^{-H(\tau'-\tau)}|q\rangle &= \langle q'|\mathrm{e}^{-H(\tau'-\tau_{N-1})}\mathrm{e}^{-H(\tau_{N-1}-\tau_{N-2})}\ldots\mathrm{e}^{-H(\tau_1-\tau)}|q\rangle \\
&= \int \prod_{l=1}^{N-1} dq^{(l)} \langle q'|\mathrm{e}^{-H\epsilon}|q^{(N-1)}\rangle \times \\
&\quad \langle q^{(N-1)}|\mathrm{e}^{-H\epsilon}|q^{(N-2)}\rangle \ldots \langle q^{(1)}|\mathrm{e}^{-H\epsilon}|q\rangle \,. \qquad (2.18)
\end{aligned}$$

Aqui $|q^{(l)}\rangle$ denota o conjunto completo de autoestados que foi introduzido no l-ésimo passo de tempo intermediário.

Para avaliar os elementos de matriz em (2.18) precisaremos especificar a estrutura do hamiltoniano. Assim, supomos que ela seja da forma simples

$$H = \frac{1}{2}P^2 + V(Q)\,. \qquad (2.19)$$

Fazendo uso da fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff,

$$\mathrm{e}^A\mathrm{e}^B = \mathrm{e}^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]+\cdots}\,, \qquad (2.20)$$

concluímos que $\mathrm{e}^{-H\epsilon}$ pode ser aproximado para ϵ pequeno, dando

$$\mathrm{e}^{-H\epsilon} = \mathrm{e}^{-\epsilon\frac{1}{2}P^2-\epsilon V(Q)} \approx \mathrm{e}^{-\epsilon\frac{1}{2}P^2}\mathrm{e}^{-\epsilon V(Q)}\,. \qquad (2.21)$$

Se segue que

$$\begin{aligned}
\langle q^{(l+1)}|\mathrm{e}^{-H\epsilon}|q^{(l)}\rangle &\approx \langle q^{(l+1)}|\mathrm{e}^{-\epsilon\frac{1}{2}P^2}\mathrm{e}^{-\epsilon V(Q)}|q^{(l)}\rangle \\
&= \langle q^{(l+1)}|\mathrm{e}^{-\epsilon\frac{1}{2}P^2}|q^{(l)}\rangle\mathrm{e}^{-\epsilon V(q^{(l)})}\,. \qquad (2.22)
\end{aligned}$$

Para avaliar os elementos de matriz remanescentes introduzimos um conjunto completo de autoestados de momento à direita e à esquerda de $\mathrm{e}^{-\epsilon\frac{1}{2}P^2}$ e em seguida usamos a identidade (2.5). Assim, temos que

$$\begin{aligned}
\langle q^{(l+1)}|\mathrm{e}^{-H\epsilon}|q^{(l)}\rangle &\approx \mathrm{e}^{-\epsilon V(q^{(l)})}\langle q^{(l+1)}|\mathrm{e}^{-\epsilon\frac{1}{2}P^2}|q^{(l)}\rangle \\
&= \mathrm{e}^{-\epsilon V(q^{(l)})}\int dp^{(l)}dp'^{(l)}\langle q^{(l+1)}|p^{(l)}\rangle\langle p^{(l)}|\mathrm{e}^{-\epsilon\frac{1}{2}P^2}|p'^{(l)}\rangle\langle p'^{(l)}|q^{(l)}\rangle \\
&= \mathrm{e}^{-\epsilon V(q^{(l)})}\int dp^{(l)}dp'^{(l)}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{ip^{(l)}q^{(l+1)}}\langle p^{(l)}|p'^{(l)}\rangle\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{-ip'^{(l)}q^{(l)}}\mathrm{e}^{-\epsilon\frac{1}{2}\left(p'^{(l)}\right)^2} \\
&= \mathrm{e}^{-\epsilon V(q^{(l)})}\int dp^{(l)}\frac{1}{2\pi}\mathrm{e}^{ip^{(l)}\left(q^{(l+1)}-q^{(l)}\right)}\mathrm{e}^{-\epsilon\frac{1}{2}\left(p^{(l)}\right)^2} \\
&= \mathrm{e}^{-\epsilon V(q^{(l)})}\int dp^{(l)}\frac{1}{2\pi}\exp\left\{-\epsilon\left[\frac{1}{2}p^{(l)2} - ip^{(l)}\left(\frac{q^{(l+1)}-q^{(l)}}{\epsilon}\right)\right]\right\}\,.
\end{aligned}$$

‡ Devemos nos referir a τ como "tempo".

Substituindo em (2.18) obtemos a representação por integral de trajetória aproximada no espaço de fase, válida para ϵ pequeno

$$\begin{aligned}\langle q'|\mathrm{e}^{-H(\tau'-\tau)}|q\rangle &\approx \int \prod_{l=1}^{N-1} dq^{(l)} \prod_{l=0}^{N-1} \\ &\quad \times \mathrm{e}^{-\epsilon V(q^{(l)})} \int dp^{(l)} \frac{1}{2\pi} \exp\left\{-\epsilon\left[\frac{1}{2}p^{(l)^2} - ip^{(l)}\left(\frac{q^{(l+1)}-q^{(l)}}{\epsilon}\right)\right]\right\} \\ &= \int DqDp \exp\left\{\epsilon\, i\, p^{(l)}\left(\frac{q^{(l+1)}-q^{(l)}}{\epsilon}\right)\right\} \mathrm{e}^{-\epsilon H\left(q^{(l)},p^{(l)}\right)}, \end{aligned} \tag{2.23}$$

onde

$$q^{(0)} = q\ ,\ q^{(N)} = q'\,, \tag{2.24a}$$

$$DqDp = \prod_{l=1}^{N-1} dq^{(l)} \prod_{l=0}^{N-1} \frac{dp^{(l)}}{2\pi}\,, \tag{2.24b}$$

e

$$H(q^{(l)}, p^{(l)}) = \frac{1}{2}p^{(l)^2} + V(q^{(l)})\,. \tag{2.24c}$$

Note que o número de integrações sobre o momento excede aquele sobre as coordenadas.

Na verdade, a fórmula acima (2.23) permanece válida para qualquer hamiltoniano da forma $H(Q,P) = T(P) + V(Q)$, com $T(P)$ um polinômio no momento canônico. Para o caso em que $T(P)$ tem uma forma quadrática dada em (2.19), podemos também obter uma representação por integral de trajetória no espaço de configurações realizando a integral gaussiana sobre o momento. Se o tempo da divisão ϵ é infinitesimal, então

$$\frac{q^{(l+1)}-q^{(l)}}{\epsilon} = \dot{q}^{(l)}\,. \tag{2.25}$$

Agora podemos determinar a representação por integral de trajetória no espaço de configurações para o hamiltoniano dado pela equação (2.19),

$$\begin{aligned}&\langle q'|\mathrm{e}^{-H(\tau'-\tau)}|q\rangle \\ &\approx \int DqDp \exp\left\{\epsilon\, i\, p^{(l)}\left(\frac{q^{(l+1)}-q^{(l)}}{\epsilon}\right)\right\} \mathrm{e}^{-\epsilon H\left(q^{(l)},p^{(l)}\right)} \\ &= \int \prod_{l=1}^{N-1} dq^{(l)} \prod_{l=0}^{N-1} \frac{dp^{(l)}}{2\pi} \mathrm{e}^{\epsilon i p^{(l)}\dot{q}^{(l)}} \exp\left\{-\epsilon\left[\frac{1}{2}p^{(l)^2} + V(q^{(l)})\right]\right\} \\ &= \int \prod_{l=1}^{N-1} dq^{(l)} \prod_{l=0}^{N-1} \mathrm{e}^{-\epsilon V(q^{(l)})} \int \frac{dp^{(l)}}{2\pi} \exp\left\{-\epsilon\left[\frac{1}{2}p^{(l)^2} - ip^{(l)}\dot{q}^{(l)}\right]\right\} \\ &= \int \prod_{l=1}^{N-1} dq^{(l)} \prod_{l=0}^{N-1} \mathrm{e}^{-\epsilon V(q^{(l)})} \frac{1}{\sqrt{2\pi\epsilon}} \exp\left(-\epsilon\frac{1}{2}\dot{q}^{(l)^2}\right) \\ &= \frac{1}{(2\pi\epsilon)^{N/2}} \int \prod_{l=1}^{N-1} dq^{(l)} \prod_{l=0}^{N-1} \mathrm{e}^{-\epsilon V(q^{(l)})} \exp\left(-\epsilon\frac{1}{2}\dot{q}^{(l)^2}\right) \\ &= \frac{1}{(2\pi\epsilon)^{N/2}} \int \prod_{l'=1}^{N-1} dq^{(l')} \mathrm{e}^{-\sum_{l=0}^{N-1} \epsilon L_E(q^{(l)},\dot{q}^{(l)})}\,, \end{aligned} \tag{2.26}$$

onde

$$L_E(q^{(l)}, \dot{q}^{(l)}) = \frac{1}{2}\dot{q}^{(l)^2} + V(q^{(l)})\,. \tag{2.27}$$

O subíndice "E" em L_E é para nos lembrar que estamos estudando a função de Green na formulação euclidiana.

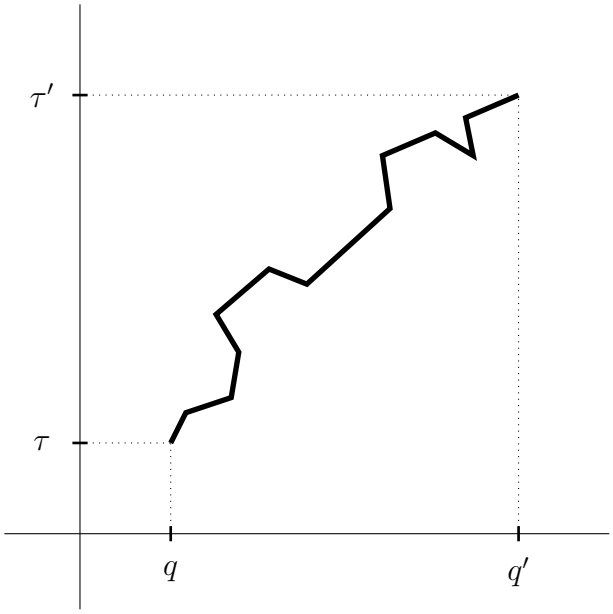

Figura 1 – Um caminho conectando os pontos (q, τ) e (q', τ') do espaço-tempo que contribui à integral (2.26).

Fonte: Elaborada pelo autor.

Para interpretar o lado direito de (2.26), considere um caminho arbitrário conectando os pontos do espaço-tempo (q, τ) e (q', τ'), consistindo de segmentos de linhas retas em cada intervalo de tempo infinitesimal. Denotemos por $q^{(l)}$ a coordenada do sistema no tempo τ_l (veja a Figura 1). Então $\dot{q}^{(l)}$ é a "velocidade euclidiana" no intervalo de tempo $[\tau_l, \tau_{l+1}]$ de uma partícula se movendo em um espaço de configurações unidimensional e L_E é a versão discretizada da lagrangiana clássica na formulação euclidiana. A ação associada ao caminho ilustrado é dada por

$$S_E[q] = \sum_{l=0}^{N-1} \epsilon \left[\frac{1}{2}\left(\dot{q}(\tau_l)\right)^2 + V(q(\tau_l))\right]\,. \tag{2.28}$$

Esta é a expressão que aparece no argumento da exponencial em (2.26). Portanto, para calcular as funções de Green euclidianas temos a seguinte prescrição:

i) Divida o intervalo $[\tau, \tau']$ em segmentos infinitesimais de comprimento $\epsilon = (\tau - \tau')/N$.

ii) Considere todos os caminhos possíveis começando em q no tempo τ e terminando em q' no tempo τ'. Aproxime esses caminhos por segmentos de linha reta como mostrado na Figura 1 e calcule a ação (2.28) para cada caminho.

iii) Cada caminho precisa ser "pesado" com um fator multiplicativo $\exp(-S_E[q])$, e em seguida todas essas exponenciais devem ser somadas sobre todos os caminhos. Tal soma é realizada integrando-se todos os valores possíveis da coordenada $q^{(l)}$ nos tempos intermediários.

iv) Devemos multiplicar o resultado por um fator global de normalização, a saber, $(1/2\pi\epsilon)^{N/2}$, e tomar o limite $\epsilon \to 0$, $N \to \infty$, mantendo o produto $N\epsilon = (\tau - \tau')$ fixo.

O resultado dos passos i) e ii) é formalmente denotado por

$$(q', \tau'|q, \tau) = \int_q^{q'} Dq\, e^{-S_E[q]}\,, \tag{2.29}$$

onde

$$S_E[q] = \int_\tau^{\tau'} d\tau'' L_E\left(q(\tau''), \dot{q}(\tau'')\right)\,, \tag{2.30}$$

e no qual por conveniência foi introduzida a notação

$$(q', \tau'|q, \tau) \equiv \langle q'|e^{-H(\tau'-\tau)}|q\rangle\,, \tag{2.31}$$

em analogia à (2.12). Esta é a expressão para a integral de trajetória na formulação euclidiana que queríamos obter.

Note que, como os caminhos em (2.29) são pesados com $\exp(-S_E[q])$, espera-se que as contribuições importantes venham daqueles caminhos para os quais $S_E[q]$ toma valores próximos ao mínimo, isto é,

$$\delta S_E[q] = 0\,.$$

Este é o principio da mínima ação que leva às equações euclidianas clássicas de movimento. Portanto, dentro do quadro da integral de trajetória, a quantização de um sistema clássico consiste em levar em conta as flutuações em torno do caminho clássico. Na formulação euclidiana essas flutuações são exponencialmente suprimidas se $S_E \geq 0$. Por outro lado, na formulação para tempo real, um procedimento análogo leva à seguinte representação por integral de trajetória da função de Green

$$\langle q'|e^{-iH(t'-t)}|q\rangle = \int_q^{q'} Dq\, e^{iS[q]}\,, \tag{2.32}$$

onde $S[q]$ é a ação para tempo real. Como a integral de trajetória (2.32) para tempos reais envolve caminhos que são pesados com um fator oscilatório, então essa representação não é adequada para cálculos numéricos, pois os termos oscilantes dificultam a convergência dos cálculos e também são mal condicionados.

2.2 Integral de Trajetória Multidimensional

A determinação da integral de trajetória euclidiana para o caso de um sistema quântico com D graus de liberdade é obtida por meio de um procedimento análogo ao realizado na seção anterior para o caso de um sistema quântico com apenas um grau de liberdade. Assim, não iremos nos preocupar com os detalhes matemáticos para a sua obtenção.

Denotemos coletivamente por $q = \{q_1, \dots q_D\}$ os graus de liberdade do sistema e $|q\rangle$ os autoestados simultâneos dos correspondentes operadores $Q = \{Q_1, \dots Q_D\}$, isto é,

$$Q_\alpha |q\rangle = q_\alpha |q\rangle \,, \quad \alpha = 1, \dots, D. \tag{2.33}$$

Considere que o hamiltoniano do sistema seja da forma

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^{D} P_\alpha^2 + V(Q) \,. \tag{2.34}$$

A representação por integral de trajetória da função de Green euclidiana

$$(q', \tau' | q, \tau) = \langle q_1', \dots, q_D' | e^{-H(\tau' - \tau)} | q_1, \dots, q_D \rangle \tag{2.35}$$

é

$$(q', \tau' | q, \tau) = \int_q^{q'} Dq \, e^{-S_E[q]} \,, \tag{2.36}$$

onde a ação euclidiana é dada por

$$S_E[q] = \int_\tau^{\tau'} d\tau'' L_E \left(q(\tau''), \dot{q}(\tau'') \right) \,, \tag{2.37}$$

com a lagrangiana euclidiana sendo

$$L_E(q^{(l)}, \dot{q}^{(l)}) = \sum_{\alpha=1}^{D} \frac{1}{2} \dot{q}_\alpha^{(l)^2} + V(q^{(l)}) \,. \tag{2.38}$$

A integral de trajetória é calculada como segue:

i) Divida o intervalo $[\tau, \tau']$ em segmentos infinitesimais de comprimento $\epsilon = (\tau - \tau')/N$.

ii) Considere todos os caminhos possíveis começando em q no tempo τ e terminando em q' no tempo τ'. Aproxime esses caminhos por segmentos de linha reta e calcule a ação

$$S_E[q] = \sum_{l=0}^{N-1} \epsilon \left[\sum_{\alpha=1}^{D} \frac{1}{2} \left(\frac{q_\alpha^{(l+1)} - q_\alpha^{(l)}}{\epsilon} \right)^2 + V(q(\tau_l)) \right] \tag{2.39}$$

para cada caminho.

iii) Cada caminho precisa ser pesado com $\exp(-S_E[q])$ e em seguida todas essas exponenciais devem ser somadas sobre todos os caminhos. Tal soma é realizada integrando-se todos os valores possíveis da coordenada $q^{(l)}$ nos tempos intermediários.

iv) Devemos multiplicar o resultado por um fator de normalização, a saber, $(1/2\pi\epsilon)^{ND/2}$, e tomar o limite $\epsilon \to 0$, $N \to \infty$, mantendo o produto $N\epsilon = (\tau - \tau')$ fixo.

2.3 Funções de n pontos

Em mecânica quântica toda a informação física sobre um sistema quântico está contida na função de Green (2.35). Em teoria quântica de campos, por outro lado, essa informação está armazenada em um conjunto infinito de valores esperados no vácuo de produtos de operadores de Heisenberg dos campos. Esses valores esperados são chamados de função de Green ou função de n pontos. Assim, esta seção será dedicada ao estudo das funções de n pontos no contexto da mecânica quântica, onde, em vez de essas funções de n pontos envolverem os valores esperados no vácuo de produtos de operadores de Heisenberg dos campos, elas naturalmente envolverão os valores esperados no estado fundamental de produtos de operadores de Heisenberg das coordenadas. Deste modo, a diferença essencial é que em mecânica quântica aparecem produtos de operadores de coordenadas, enquanto que em teoria quântica de campos esses operadores de coordenadas são substituídos por operadores de campos.

Agora considere um sistema quântico com D graus de liberdade. Seja T o operador de ordenação do tempo, isto é, ele ordena os operadores de Heisenberg da esquerda para a direita em ordem decrescente do tempo. A função de n pontos é definida por

$$G_{\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_n}(\tau_1, \tau_2, \ldots, \tau_n) \equiv \langle E_0|T(Q_{\alpha_1}(\tau_1)Q_{\alpha_2}(\tau_2)\ldots Q_{\alpha_n}(\tau_n))|E_0\rangle\,, \tag{2.40}$$

que é simplesmente o valor esperado de $T(Q_{\alpha_1}(\tau_1)\ldots Q_{\alpha_n}(\tau_n))$ no estado fundamental. Note que $Q_{\alpha_i}(\tau_i)$ é o operador de Heisenberg

$$Q_{\alpha_i}(\tau_i) = e^{H\tau_i}Q_{\alpha_i}e^{-H\tau_i} \tag{2.41}$$

para tempos imaginários.

Para derivar a representação por integral de trajetória para a função de n pontos (2.40) deveremos proceder em dois passos. Inicialmente será mostrado que a função de n pontos está relacionada ao elemento de matriz

$$\begin{aligned}&(q', \tau'|Q_{\alpha_1}(\tau_1)Q_{\alpha_2}(\tau_2)\ldots Q_{\alpha_n}(\tau_n)|q, \tau)\\ &\equiv \langle q'|e^{-H\tau'}Q_{\alpha_1}(\tau_1)Q_{\alpha_2}(\tau_2)\ldots Q_{\alpha_n}(\tau_n)e^{H\tau}|q\rangle\,.\end{aligned} \tag{2.42}$$

Assim, inserimos um conjunto completo de autoestados de energia à esquerda e à direita dos operadores $\exp(H\tau)$ e $\exp(-H\tau')$ em (2.42)

$$\begin{aligned}&(q',\tau'|Q_{\alpha_1}(\tau_1)\dots Q_{\alpha_n}(\tau_n)|q,\tau)\\&=\sum_{\kappa,\kappa'}\mathrm{e}^{-E_{\kappa'}\tau'}\mathrm{e}^{E_\kappa\tau}\psi_{\kappa'}(q')\psi^*_\kappa(q)\langle E_{\kappa'}|Q_{\alpha_1}(\tau_1)\dots Q_{\alpha_n}(\tau_n)|E_\kappa\rangle\,,\end{aligned}\tag{2.43}$$

onde naturalmente $\psi_i(q)=\langle q|E_i\rangle$. Supondo que existe um gap de energia entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado, então para grande valores positivos e negativos de τ' e τ os únicos termos importantes nas somas em κ e κ' em (2.43) são os termos do estado fundamental para o qual $\kappa,\kappa'=0$, isto é,

$$\begin{aligned}&(q',\tau'|Q_{\alpha_1}(\tau_1)\dots Q_{\alpha_n}(\tau_n)|q,\tau)\\&\underset{\substack{\tau'\to\infty\\ \tau\to-\infty}}{\longrightarrow}\mathrm{e}^{-E_0(\tau'-\tau)}\psi_0(q')\psi^*_0(q)\langle E_0|Q_{\alpha_1}(\tau_1)\dots Q_{\alpha_n}(\tau_n)|E_0\rangle\,.\end{aligned}\tag{2.44}$$

Além disso, substituindo os $Q_{\alpha_i}(\tau_i)$'s nesta expressão pelo operador unidade, temos que

$$(q',\tau'|q,\tau)\underset{\substack{\tau'\to\infty\\ \tau\to-\infty}}{\longrightarrow}\mathrm{e}^{-E_0(\tau'-\tau)}\psi_0(q')\psi^*_0(q)\,.\tag{2.45}$$

De (2.44) e (2.45), vemos que a função de n pontos pode ser escrita como

$$\langle E_0|Q_{\alpha_1}(\tau_1)\dots Q_{\alpha_n}(\tau_n)|E_0\rangle=\left.\frac{(q',\tau'|Q_{\alpha_1}(\tau_1)\dots Q_{\alpha_n}(\tau_n)|q,\tau)}{(q',\tau'|q,\tau)}\right|_{\substack{\tau'\to\infty\\ \tau\to-\infty}}\,,\tag{2.46}$$

desde que $\langle q|E_0\rangle=\psi_0(q)$ e $\langle q'|E_0\rangle=\psi_0(q')$ sejam não nulos, ou seja, a função de onda no estado fundamental não pode se anular em q e q'.

A expressão (2.46) permanece válida para qualquer tempo arbitrário $\tau_1,\dots,\tau_n$, então segue que uma expressão correspondente também permanece válida para o produto ordenado no tempo dos operadores de coordenadas, isto é,

$$\langle E_0|T(Q_{\alpha_1}(\tau_1)\dots Q_{\alpha_n}(\tau_n))|E_0\rangle=\left.\frac{(q',\tau'|T(Q_{\alpha_1}(\tau_1)\dots Q_{\alpha_n}(\tau_n))|q,\tau)}{(q',\tau'|q,\tau)}\right|_{\substack{\tau'\to\infty\\ \tau\to-\infty}}\,.\tag{2.47}$$

Isto completa o primeiro passo para a derivação da representação por integral de trajetória para a função de n pontos (2.40).

Agora naturalmente precisamos derivar uma representação análoga para a expressão $(q',\tau'|T(Q_{\alpha_1}(\tau_1)\dots Q_{\alpha_n}(\tau_n))|q,\tau)$. Assim, consideramos inicialmente que $\tau'\geq\tau_1>\tau_2>\dots>\tau_n\geq\tau$. Fazendo uso da expressão do operador de Heisenberg (2.41), podemos escrever

$$\begin{aligned}&(q',\tau'|Q_{\alpha_1}(\tau_1)Q_{\alpha_2}(\tau_2)\dots Q_{\alpha_n}(\tau_n)|q,\tau)\\&=\langle q'|e^{-H(\tau'-\tau_1)}Q_{\alpha_1}(\tau_1)e^{-H(\tau_1-\tau_2)}Q_{\alpha_2}(\tau_2)\dots e^{-H(\tau_{n-1}-\tau_n)}Q_{\alpha_n}(\tau_n)e^{-H(\tau_n-\tau)}|q\rangle\,.\end{aligned}$$

Devemos inserir um conjunto completo de autoestados de $\{Q_\alpha\}$ à direita e à esquerda de cada operador Q_α, isto é,

$$
\begin{aligned}
&(q',\tau'|Q_{\alpha_1}(\tau_1)Q_{\alpha_2}(\tau_2)\dots Q_{\alpha_n}(\tau_n)|q,\tau)\\
&=\int\prod_{i=1}^{l}dq^{(i)}\langle q'|e^{-H(\tau'-\tau_1)}|q^{(1)}\rangle\langle q^{(1)}|Q_{\alpha_1}(\tau_1)|q^{(1)}\rangle\langle q^{(1)}|e^{-H(\tau_1-\tau_2)}|q^{(2)}\rangle\\
&\quad\langle q^{(2)}|Q_{\alpha_2}(\tau_2)|q^{(2)}\rangle\langle q^{(2)}|\dots e^{-H(\tau_{n-1}-\tau_n)}|q^{(n)}\rangle\langle q^{(n)}|Q_{\alpha_n}(\tau_n)|q^{(n)}\rangle\langle q^{(n)}|e^{-H(\tau_n-\tau)}|q\rangle\\
&=\int\prod_{i=1}^{l}dq^{(i)}\langle q'|e^{-H(\tau'-\tau_1)}|q^{(1)}\rangle q^{(1)}_{\alpha_1}\langle q^{(1)}|e^{-H(\tau_1-\tau_2)}|q^{(2)}\rangle q^{(2)}_{\alpha_2}\langle q^{(2)}|\\
&\quad\dots e^{-H(\tau_{n-1}-\tau_n)}|q^{(n)}\rangle q^{(n)}_{\alpha_n}\langle q^{(n)}|e^{-H(\tau_n-\tau)}|q\rangle\,.
\end{aligned}
$$

De (2.36), temos que cada elemento de matriz $\langle q^{(i)}|e^{-H(\tau_i-\tau_j)}|q^{(j)}\rangle=(q^{(i)},\tau_i|q^{(j)},\tau_j)$ corresponde a uma integral de trajetória, isto é,

$$
(q^{(i)},\tau_i|q^{(j)},\tau_j)=\int_{q^{(j)}}^{q^{(i)}}Dq\,e^{-S_E[q]}\,.
$$

Assim, podemos reescrever

$$
(q',\tau'|Q_{\alpha_1}(\tau_1)Q_{\alpha_2}(\tau_2)\dots Q_{\alpha_n}(\tau_n)|q,\tau)\,,
$$

como segue

$$
\begin{aligned}
&\int\prod_{i=1}^{l}dq^{(i)}q^{(1)}_{\alpha_1}q^{(2)}_{\alpha_2}\dots q^{(n)}_{\alpha_n}\int_{q^{(1)}}^{q'}Dq\,e^{-S_E[q]}\int_{q^{(2)}}^{q^{(1)}}Dq\,e^{-S_E[q]}\dots\int_{q^{(\tau)}}^{q^{(l)}}Dq\,e^{-S_E[q]}\\
&=\quad\int_{q^{(\tau)}}^{q^{(\tau')}}Dq\,q^{(1)}_{\alpha_1}q^{(2)}_{\alpha_2}\dots q^{(n)}_{\alpha_n}e^{-S_E[q]}\,,\quad(\tau'\geq\tau_1>\tau_2>\dots>\tau_n\geq\tau)\,.
\end{aligned}
$$

Note que para obter a expressão acima exigimos que $\tau'\geq\tau_1>\tau_2>\dots>\tau_n\geq\tau$. Por outro lado, se considerarmos uma outra sequência decrescente para τ_i, com $i=1,2,\dots,n$, então a única coisa que deveria mudar na expressão acima é a ordem do produto de coordenadas $q^{(i)}_{\alpha_i}$'s. Porém, já que $q^{(i)}_{\alpha_i}$ é uma variável clássica comutante, então a ordem desses termos não altera a integral de trajetória resultante acima. Portanto, concluímos que

$$
(q',\tau'|T(Q_{\alpha_1}(\tau_1)\dots Q_{\alpha_n}(\tau_n))|q,\tau)=\int_{q^{(\tau)}}^{q^{(\tau')}}Dq\,q^{(1)}_{\alpha_1}\dots q^{(n)}_{\alpha_n}e^{-S_E[q]}\,,\tag{2.48}
$$

onde $S_E[q]$ é dado pela equação (2.37).

A integral de trajetória em (2.48) pode ser calculada a partir de uma prescrição análoga àquela vista para a função de Green[§] na seção 2.2:

i) Divida o intervalo $[\tau,\tau']$ em segmentos infinitesimais de comprimento $\epsilon=(\tau-\tau')/N$.

§ Apenas a expressão do peso muda para cada caminho, agora devemos pesar com $\exp(-S_E[q])$, e adicionalmente com o produto de coordenadas $q_{\alpha_1},q_{\alpha_2},\dots,q_{\alpha_n}$ nos tempos $\tau_{\alpha_1},\tau_{\alpha_2},\dots,\tau_{\alpha_n}$, respectivamente.

ii) Considere todos os caminhos possíveis começando em q no tempo τ e terminando em q' no tempo τ'. Aproxime esses caminhos por segmentos de linha reta e calcule a ação

$$S_E[q] = \sum_{l=0}^{N-1} \epsilon \left[\sum_{\alpha=1}^{D} \frac{1}{2} \left(\frac{q_\alpha^{(l+1)} - q_\alpha^{(l)}}{\epsilon} \right)^2 + V(q(\tau_l)) \right] \tag{2.49}$$

para cada caminho.

iii) Cada caminho precisa ser pesado com $\exp(-S_E[q])$ e o produto das coordenadas $q_{\alpha_1}, q_{\alpha_2}, \ldots, q_{\alpha_n}$ nos tempos $\tau_{\alpha_1}, \tau_{\alpha_2}, \ldots, \tau_{\alpha_n}$, respectivamente. Deve ser feita a soma de todas as contribuições para cada caminho. Tal soma é realizada integrando-se todos os valores possíveis da coordenada $q^{(l)}$ nos tempos intermediários.

iv) Devemos multiplicar o resultado por um fator de normalização, a saber $(1/2\pi\epsilon)^{ND/2}$, e tomar o limite $\epsilon \to 0$, $N \to \infty$, mantendo o produto $N\epsilon = (\tau - \tau')$ fixo.

Agora finalmente estamos prontos para escrever uma expressão para a representação por integral de trajetória euclidiana da função de n pontos. Substituindo (2.36) e (2.48) em (2.47), temos

$$\langle E_0 | T(Q_{\alpha_1}(\tau_1) \ldots Q_{\alpha_n}(\tau_n)) | E_0 \rangle = \frac{\int_{q(\tau\to-\infty)}^{q(\tau'\to+\infty)} Dq\, q_{\alpha_1}^{(1)} \ldots q_{\alpha_n}^{(n)} e^{-S_E[q]}}{\int_{q(\tau\to-\infty)}^{q(\tau'\to+\infty)} Dq\, e^{-S_E[q]}}\,, \tag{2.50}$$

onde

$$S_E[q] = \int_{\tau\to-\infty}^{\tau'\to+\infty} d\tau'' L_E(q(\tau''), \dot{q}(\tau''))\,, \tag{2.51}$$

é a ação euclidiana associada ao caminho $q(\tau)$. As integrais em (2.50) são realizadas sobre todos os caminhos começando e terminando em pontos arbitrários nos tempo $\tau \to -\infty$ e $\tau' \to +\infty$, respectivamente. Lembremos que a expressão (2.50) para a função de n pontos é válida apenas se a função de onda no estado fundamental não se anular em q e q'. Em cálculos práticos o tamanho de $\langle q|E_0\rangle$ e $\langle q'|E_0\rangle$ é importante. A razão é que na maioria dos casos de interesse não podemos calcular a integral de trajetória analiticamente, mas devemos recorrer a métodos numéricos que naturalmente serão a ferramenta de trabalho principal ao longo deste projeto. Assim, somos forçados a calcular múltiplas integrais em redes de tempo finito. É essencial que as contribuições da soma em (2.43) vindas de estados de energia maiores sejam suprimidas tanto quanto possível. Quando a função de n pontos (2.50) é calculada numericamente, geralmente se impõem condições periódicas de contorno, isto é, $q = q'$, e se permite tomar valores arbitrários de q.

A representação por integral de trajetória das funções de n pontos abre a possibilidade de estudar teorias de campos não-perturbativamente. Se considerarmos o lado direito da função de n pontos (2.50), se a ação é limitada por baixo, então essa expressão

tem a forma de uma média em um ensemble estatístico, com a distribuição de Boltzmann dada por $\exp(-S_E[q])$. Isto nos permite usar os métodos estatísticos bem conhecidos para calcular as funções de n pontos nas teorias quânticas de campos. Por causa dessa semelhança com a mecânica estatística, chamaremos as funções de n pontos euclidianas como *funções de correlações*, e escreveremos (2.50) na forma

$$\langle q_{\alpha_1(\tau_1)} \dots q_{\alpha_n(\tau_n)} \rangle = \frac{1}{Z} \int_{q(\tau \to -\infty)}^{q(\tau' \to +\infty)} Dq \, q_{\alpha_1}^{(1)} \dots q_{\alpha_n}^{(n)} e^{-S_E[q]} \,, \tag{2.52}$$

onde

$$Z = \int_{q(\tau \to -\infty)}^{q(\tau' \to +\infty)} Dq \, e^{-S_E[q]} \,. \tag{2.53}$$

Apesar de as funções de correlações (2.52) não serem médias de ensembles canônicos de mecânica estatística, ainda deveremos nos referir a (2.53) como função de partição.

3 INTEGRAL DE TRAJETÓRIA EM TEORIA QUÂNTICA DE CAMPOS

Agora devemos generalizar os resultados obtidos na formulação de integral de trajetória euclidiana da mecânica quântica para a teoria quântica de campos. A generalização para campos bosônicos é direta, uma vez que eles são campos comutantes assim como eram os operadores de coordenadas em mecânica quântica. A generalização para campos fermiônicos também funciona, mas precisaremos tomar o cuidado adicional com a posição de cada campo, pois eles são anticomutantes.

O conteúdo deste capítulo também é parcialmente baseado no livro texto de H.J. Rothe,[9] suplementado com outras referências citadas abaixo.

3.1 Integral de Trajetória para Campos Bosônicos

Conseguimos escrever uma representação por integral de trajetória euclidiana para sistemas quânticos possuindo um (q) ou vários $(q_1, q_2, \ldots, q_D)$ graus de liberdade. Agora esses resultados serão generalizados para a teoria quântica de campos bosônicos. Para isso, deveremos considerar o operador de campo mais simples, a saber, o campo escalar real. A função $\phi(\vec{x}, t)$ do campo escalar pode ser vista como a coordenada generalizada $q_\alpha(t)$ dependendo do "índice contínuo" $\vec{x}$ no lugar do índice discreto α.[10] Assim, um campo é um sistema quântico com infinitos graus de liberdade. Sua dinâmica é descrita por uma função de Lagrange que em teoria de campos locais pode ser escrita como uma integral sobre a densidade de lagrangiana

$$L = \int d^3x \mathcal{L}(\phi(\vec{x}, t), \partial_\mu \phi(\vec{x}, t)) \,. \tag{3.1}$$

Introduzindo o campo canonicamente conjugado

$$\pi(\vec{x}, t) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_0 \phi)} \,, \tag{3.2}$$

o hamiltoniano correspondente é dado por

$$H = \int d^3x \, \mathcal{H}(\pi, \phi) = \int d^3x \, (\pi \partial_0 \phi - \mathcal{L}) \,. \tag{3.3}$$

No formalismo da quantização canônica, as funções de campo $\phi(\vec{x}, t)$ e $\pi(\vec{x}, t)$ são convertidas em operadores $\mathbf{\Phi}(\vec{x}, t)$ e $\mathbf{\Pi}(\vec{x}, t)$ para os quais são postuladas as seguintes relações de comutação canônicas em tempos iguais

$$[\mathbf{\Phi}(\vec{x}, t), \mathbf{\Pi}(\vec{y}, t)] = i\delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}) \,, \tag{3.4a}$$

$$[\mathbf{\Phi}(\vec{x}, t), \mathbf{\Phi}(\vec{y}, t)] = [\mathbf{\Pi}(\vec{x}, t), \mathbf{\Pi}(\vec{y}, t)] = 0 \,. \tag{3.4b}$$

Em analogia a um sistema quântico com número finito de graus de liberdade, podemos definir o operador de campo de Heisenberg

$$\mathbf{\Phi}(\vec{x},t) = e^{iHt}\mathbf{\Phi}(\vec{x},0)e^{-iHt}\,, \tag{3.5}$$

que satisfaz as seguintes relações de autoestado dependente do tempo

$$\mathbf{\Phi}(\vec{x},t)|\phi,t\rangle = \phi(\vec{x})|\phi,t\rangle\,, \tag{3.6}$$

onde a dependência temporal do vetor de base $|\phi,t\rangle$, expressa em termos do vetor de Heisenberg constante $|\phi\rangle$, é escrita como

$$|\phi,t\rangle = e^{iHt}|\phi,0\rangle \equiv e^{iHt}|\phi\rangle\,. \tag{3.7}$$

A amplitude de transição entre dois vetores de estado tomados em diferentes tempos, isto é, a função de Green ou função de 0 pontos é dada por

$$G(\phi',t';\phi,t) = \langle\phi',t'|\phi,t\rangle = \langle\phi'|e^{-i(t'-t)H}|\phi\rangle\,. \tag{3.8}$$

Esta é a amplitude de probabilidade de fazer uma transição da configuração de campo $\phi(\vec{x})$ no tempo t para a configuração de campo $\phi'(\vec{x})$ no tempo t'. O conhecimento da função de Green (3.8) é suficiente para responder qualquer questão sobre dinâmica dos campos quânticos, se realizarmos projeções adequadas.

No entanto, se estivermos interessados em processos que envolvam a criação e aniquilação de partículas, como é o caso para o espectro de hádrons, então precisaremos conhecer os valores das funções de n pontos, isto é, os valores esperados no vácuo de produtos de operadores de Heisenberg de campo. Assim, para o campo escalar as funções de n pontos serão definidas como

$$G(x,y,\ldots) = \langle\Omega|T(\mathbf{\Phi}(x)\mathbf{\Phi}(y)\ldots)|\Omega\rangle\,, \tag{3.9}$$

onde $x = (x^0,\vec{x})$, $y = (y^0,\vec{y})$,... e $|\Omega\rangle$ denota o estado fundamental (vácuo físico) do sistema cuja dinâmica é determinada pelo operador hamiltoniano H. Essas funções de n pontos têm uma representação por integral de trajetória, que pode ser formalmente obtida de (2.50) fazendo-se as substituições $Q_\alpha(t) \to \mathbf{\Phi}(\vec{x},t)$ e $q_\alpha(t) \to \phi(\vec{x},t)$

$$\langle\Omega|T(\mathbf{\Phi}(x)\mathbf{\Phi}(y)\ldots)|\Omega\rangle = \frac{\int D\phi\phi(x)\phi(y)\ldots e^{iS[\phi]}}{\int D\phi e^{iS[\phi]}}\,, \tag{3.10}$$

onde

$$S[\phi(x)] = -\frac{1}{2}\int d^4x\phi(x)\left(\Box + M^2\right)\phi(x) \tag{3.11}$$

é a ação associada à densidade de lagrangiana do campo escalar livre (na formulação de Minkowski) de massa M

$$\mathcal{L}(\phi(x)) = \frac{1}{2}\partial^\mu\phi(x)\partial_\mu\phi(x) - \frac{1}{2}M^2\phi(x)^2\,. \tag{3.12}$$

Aqui, $\int D\phi$ denota a soma sobre todas as configurações de campo $\phi(x)$ possíveis.

Agora para obter a representação euclidiana da integral de trajetória devemos realizar a rotação de Wick (veja equação (2.16)). Notando que

$$\begin{aligned} d^4x &\rightarrow dx_1dx_2dx_3(-idx_4) = -id^4x^E\,, \\ \Box &\rightarrow \left(-\vec{\partial}^2, \frac{\partial^2}{\partial(-ix_4)^2}\right) = -\left(\vec{\partial}^2, \frac{\partial^2}{\partial(x_4)^2}\right) = -\Box_E\,, \end{aligned}$$

se substituirmos as expressões acima na ação, obteremos

$$S[\phi(x)] \rightarrow i\,\frac{1}{2}\int d^4x\phi(x^E)\left(-\Box_{\mathrm{E}} + M^2\right)\phi(x^E) = iS_{\mathrm{E}}[\phi(x^{\mathrm{E}})]\,.$$

Assim, a ação euclidiana do campo escalar livre é dada por

$$S_{\mathrm{E}}[\phi] = \frac{1}{2}\int d^4x\phi(x)\left(-\Box + M^2\right)\phi(x)\,, \tag{3.13}$$

e agora x se refere ao quadrivetor euclidiano $x = (\vec{x}, x_4)$ e $\Box$ é o laplaciano quadridimensional

$$\Box = \sum_{\mu=1}^{4}\partial_\mu\partial_\mu\,. \tag{3.14}$$

A função de n pontos na formulação euclidiana é dada por

$$\langle\phi(x)\phi(y)\ldots\rangle = \frac{\int D\phi\phi(x)\phi(y)\ldots e^{-S_{\mathrm{E}}[\phi]}}{\int D\phi e^{-S_{\mathrm{E}}[\phi]}}\,, \tag{3.15a}$$

onde a medida de integração $D\phi$ é formalmente definida por

$$D\phi = \prod_{\vec{x},x_4} d\phi(\vec{x}, x_4)\,. \tag{3.15b}$$

A função de n pontos é obtida simplesmente fazendo-se a substituição $S[\phi] \rightarrow iS_{\mathrm{E}}[\phi]$ em (3.10). Assim, terminamos a generalização da representação por integral de trajetória da mecânica quântica para o campo escalar livre. Além disso, todos esses resultados permanecem válidos para qualquer sistema de campos bosônicos e a maneira de se obter a ação euclidiana S_{E} para cada sistema bosônico particular é exatamente análoga ao que fizemos nesta seção.

3.2 Integral de Trajetória para Campos Fermiônicos

Agora será derivada a representação por integral de trajetória para as funções de n pontos de operadores fermiônicos, mais precisamente, para o campo livre de Dirac, por ser essa a ação mais simples possível encontrada para campos fermiônicos. Contudo, todo o resultado aqui descrito ainda será válido para outros operadores fermiônicos mais complexos.

3.2.1 Funções de Correlação Fermiônicas

A dedução da integral de trajetória para campos fermiônicos é obtida de maneira muito parecida com o que fizemos na seção anterior para campos bosônicos, mas com uma sutileza importante: os campos fermiônicos não satisfazem a álgebra comutante, como ocorre para campos bosônicos. De fato, para campos bosônicos as variáveis que aparecem na integral de trajetória são variáveis ordinárias e, portanto, a ordem em que os campos aparecem na integral de trajetória é irrelevante, pois eles comutam entre si e podemos reorganizar as variáveis na ordem que desejarmos. Já os campos fermiônicos são variáveis anticomutantes e, portanto, agora devemos levar em consideração a ordem que os campos assumem na integral de trajetória, pois para alterar a ordem entre dois campos deve haver um "custo" de um sinal negativo na expressão resultante.

Deste modo, começamos escrevendo a equação de Dirac (para uma partícula de massa M) no espaço de Minkowski

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - M)\,\psi(x) = 0\,, \tag{3.16}$$

onde γ^μ são as matrizes 4×4 de Dirac satisfazendo as seguintes relações de anticomutação

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}\,, \tag{3.17}$$

e $\psi(x)$ é um campo de 4 componentes, marcadas por um índice grego (α, β, etc.). A equação de movimento para ψ e $\bar{\psi}$ (sendo $\bar{\psi} \equiv \psi^\dagger\gamma^0$) segue da variação da ação de Dirac em relação a $\bar{\psi}$ e ψ respectivamente. A ação de Dirac é dada por

$$S_F^0[\psi, \bar{\psi}] = \int d^4x\, \bar{\psi}(x)\,(i\gamma^\mu\partial_\mu - M)\,\psi(x)\,. \tag{3.18}$$

Note que foi usado o índice superior 0 na ação de Dirac para identificar que a ação corresponde a um férmion livre.

Em teoria quântica de campos na formulação canônica, ψ e $\psi^\dagger$ se tornam operadores, $\mathbf{\Psi}$ e $\mathbf{\Psi}^\dagger$, satisfazendo as seguintes relações canônicas para tempos iguais

$$\left\{\mathbf{\Psi}_\alpha(\vec{x},t), \mathbf{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{y},t)\right\} = \delta_{\alpha\beta}\delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{y})\,, \tag{3.19a}$$

$$\{\mathbf{\Psi}_\alpha(\vec{x},t), \mathbf{\Psi}_\beta(\vec{y},t)\} = \left\{\mathbf{\Psi}^\dagger_\alpha(\vec{x},t), \mathbf{\Psi}^\dagger_\beta(\vec{y},t)\right\} = 0\,. \tag{3.19b}$$

A representação por integral de trajetória no espaço de Minkowski da função de Green

$$\langle\Omega|T(\Psi_{\alpha 1}(x_1)\ldots\Psi_{\alpha l}(x_l)\bar{\Psi}_{\beta 1}(y_1)\ldots\bar{\Psi}_{\beta l}(y_l))|\Omega\rangle \tag{3.20a}$$

é dada por

$$\frac{\int D(\bar{\psi}\psi)(\psi_{\alpha_1}(x_1)\ldots\psi_{\alpha_l}(x_l)\bar{\psi}_{\beta_1}(y_1)\ldots\bar{\psi}_{\beta_l}(y_l))e^{iS_F^0[\psi,\bar{\psi}]}}{\int D(\bar{\psi}\psi)e^{iS_F^0[\psi,\bar{\psi}]}}\,, \tag{3.20b}$$

sendo a medida de integração $D(\bar{\psi}\psi)$ definida como

$$D(\bar{\psi}\psi) = \prod_{\alpha,x} d\bar{\psi}_\alpha(x) d\psi_\alpha(x)\,, \tag{3.20c}$$

onde α varia sobre as quatro componentes do campo e x varia continuamente sobre o espaço-tempo. Note que a expressão (3.20b) é semelhante a (3.10), obtida para campos bosônicos, mas, como já mencionamos anteriormente, agora a ordem dos campos $\psi_i(x_i)$'s e $\bar{\psi}_i(x_i)$'s na representação por integrais de trajetória da função de Green é importante, pois para alterarmos a posição de dois campos quaisquer na representação de integral de trajetória haverá o custo de um sinal negativo.

Agora que determinamos a representação por integral de trajetória da função de Green fermiônica no espaço de Minkowski, precisamos seguir o procedimento realizado na seção anterior a fim de determinar as funções de correlação fermiônicas. Assim, começamos escrevendo a ação do campo livre de Dirac no espaço de Minkowski

$$S_F^0[\psi,\bar{\psi}] = \int d^4x \bar{\psi}(x)\left(i\gamma^\mu\partial_\mu - M\right)\psi(x)\,.$$

Agora devemos fazer a rotação de Wick, isto é,

$$x_i \to {x_i}^E \qquad \text{e} \qquad x_0 \to -ix_4\,.$$

Assim, fazemos as seguintes transformações

$$\begin{aligned} d^4x &\to dx_1dx_2dx_3(-idx_4) = -id^4x^E \\ \partial_\mu &\to \left(\vec{\partial}, \frac{\partial}{\partial(-ix_4)}\right) = (\vec{\partial}, i\partial_4) = i(-i\vec{\partial},\partial_4)\,. \end{aligned}$$

Se substituirmos as expressões acima na ação, obteremos

$$S_F^0[\psi,\bar{\psi}] \to i\int d^4x^E \bar{\psi}(x^E)\left(\gamma^\mu(-i\vec{\partial},\partial_4) + M\right)\psi(x^E)\,.$$

A ação acima envolve um operador diferencial que não é muito interessante. Note que podemos fazer uma substituição conveniente

$$\gamma^i \to i\gamma_i^E \qquad \text{e} \qquad \gamma_0 \to \gamma_4^E$$

e assim obter

$$\begin{aligned} S_F^0[\psi,\bar{\psi}] &= i\int d^4x^E \bar{\psi}(x^E)\left(\gamma_\mu^E\partial_\mu^E + M\right)\psi(x^E) \\ &= iS_F^{0(\text{eucl.})}\,, \end{aligned}$$

onde o operador diferencial assume a forma desejada no espaço euclidiano, isto é, $\partial_\mu^E = (\vec{\partial},\partial_4)$. Agora é conveniente ver como a álgebra das matrizes de Dirac se altera no espaço euclidiano. Note que

$$\{\gamma^\mu,\gamma^\nu\} = \gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}\,,$$

implicando

$$\begin{aligned} \gamma^0\gamma^0 + \gamma^0\gamma^0 &= 2g^{00} \\ \rightarrow \gamma_4^E\gamma_4^E + \gamma_4^E\gamma_4^E &= +2\delta_{00} \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \gamma^i\gamma^i + \gamma^i\gamma^i &= 2g^{ii} \\ \rightarrow i\gamma_i^E i\gamma_i^E + i\gamma_i^E i\gamma_i^E &= -2\delta_{ii} \\ \rightarrow \gamma_i^E\gamma_i^E + \gamma_i^E\gamma_i^E &= 2\delta_{ii}\,. \end{aligned}$$

Assim, obtemos a relação desejada para a álgebra das matrizes gama no espaço euclidiano, a saber,

$$\left\{\gamma_\mu^E, \gamma_\nu^E\right\} = 2\delta_{\mu\nu}\,.$$

As relações de anticomutação das matrizes gama euclidianas estão associadas à métrica euclidiana. Uma breve descrição das matrizes gama euclidianas e suas propriedades básicas pode ser encontrada no Apêndice A.

Agora passaremos a omitir os índices E's que aparecem na ação de Dirac. Deste modo, a ação de Dirac para um férmion livre no espaço euclidiano é dada por

$$S_F^0[\psi, \bar{\psi}] = \int d^4x \bar{\psi}(x)\left(\gamma_\mu\partial_\mu + M\right)\psi(x)\,, \tag{3.21}$$

onde x são as variáveis euclidianas e as matrizes gama satisfazem a seguinte relação de anticomutação

$$\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = 2\delta_{\mu\nu}\,. \tag{3.22}$$

As funções de correlação fermiônicas

$$\langle\psi_{\alpha 1}(x_1)\ldots\psi_{\alpha l}(x_l)\bar{\psi}_{\beta 1}(y_1)\ldots\bar{\psi}_{\beta l}(y_l)\rangle \tag{3.23a}$$

são dadas por

$$\frac{\int D(\bar{\psi}\psi)[\psi_{\alpha_1}(x_1)\ldots\psi_{\alpha_l}(x_l)\bar{\psi}_{\beta_1}(y_1)\ldots\bar{\psi}_{\beta_l}(y_l)]\,e^{-S_F^0[\psi,\bar{\psi}]}}{\int D(\bar{\psi}\psi)e^{-S_F^0[\psi,\bar{\psi}]}}\,, \tag{3.23b}$$

onde a medida de integração $D(\bar{\psi}\psi)$ é dada por

$$D(\bar{\psi}\psi) = \prod_{\alpha,x} d\bar{\psi}_\alpha(x)d\psi_\alpha(x)\,. \tag{3.23c}$$

A determinação das funções de correlação fermiônicas pode ser obtida com a ajuda da álgebra de Grassmann.

3.2.2 Álgebra de Grassmann

Uma das propriedades que definem as partículas fermiônicas é o fato de elas satisfazerem a estatística de Fermi-Dirac. Isto implica anti-simetria sob troca de números quânticos para a função de correlação (3.23b). Assim, se fizermos a troca dos números quânticos de dois férmions

$$\alpha_i \leftrightarrow \alpha_j \ , \ x_i \leftrightarrow x_j \ \text{ ou } \ \alpha_i \leftrightarrow \beta_j \ , \ x_i \leftrightarrow y_j \ \text{ ou } \ \beta_i \leftrightarrow \beta_j \ , \ y_i \leftrightarrow y_j \, , \tag{3.24}$$

a função de correlação (3.23b) adquirirá um sinal negativo. A troca (3.24) é equivalente a comutar duas variáveis fermiônicas em (3.23b), e a exigência do aparecimento de um sinal negativo pode ser considerada como o requisito de um sinal negativo sob comutação. Deste modo, os campos fermiônicos se comportam como números anticomutativos. Por exemplo, para quaisquer combinações de índices α, β, x, y, obtemos

$$\psi_\alpha(x)\psi_\beta(y) = -\psi_\beta(y)\psi_\alpha(x) \, , \tag{3.25a}$$

$$\psi_\alpha(x)\bar{\psi}_\beta(y) = -\bar{\psi}_\beta(y)\psi_\alpha(x) \, , \tag{3.25b}$$

$$\bar{\psi}_\alpha(x)\bar{\psi}_\beta(y) = -\bar{\psi}_\beta(y)\bar{\psi}_\alpha(x) \, . \tag{3.25c}$$

Portanto, todos os graus de liberdade fermiônicos anticomutam uns com os outros. Assim, somos motivados a introduzir os números anticomutantes, denominados *números de Grassmann*.

3.2.2.1 Números de Grassmann e Derivadas

Considere um conjunto de números de Grassmann $\eta_i, i = 1, 2, \ldots N$, satisfazendo as seguintes relações de anticomutação

$$\{\eta_i, \eta_j\} = \eta_i\eta_j + \eta_j\eta_i = 0 \, . \tag{3.26}$$

A equação acima implica que os η_i's são nilpotentes, isto é, para eles vale $\eta_i^2 = 0$. Portanto, a série de potências para uma função dos η_i's termina após um número finito de termos, e a única classe relevante de funções são polinômios da forma

$$A(\eta) = a + \sum_i a_i\eta_i + \sum_{i<j} a_{ij}\eta_i\eta_j + \sum_{i<j<k} a_{ijk}\eta_i\eta_j\eta_k + \ldots + a_{12\ldots N}\eta_1\eta_2\ldots\eta_N \, , \tag{3.27}$$

com coeficientes complexos $a, a_i, a_{ij}, \ldots, a_{12\ldots N}$. Esses polinômios podem ser adicionados e multiplicados e formam a assim chamada *álgebra de Grassmann*. Os números η_i's são chamados de *geradores* da álgebra de Grassmann N-dimensional.

Podemos derivar elementos da álgebra de Grassmann em relação aos geradores. Suponha que queremos derivar $A(\eta)$ em relação a η_i. Então temos as seguintes regras.

i) Se $A(\eta)$ não depende de η_i, então $\partial_{\eta_i} A(\eta) = 0$.

ii) Se $A(\eta)$ depende de η_i, então a *derivada à esquerda* $\partial/\partial\eta_i$ é realizada trazendo-se a variável η_i à esquerda até que ela encoste na derivada, usando as relações de anticomutação (3.26), e então aplicando a regra

$$\frac{\partial}{\partial\eta_i}\eta_i = 1\,.$$

Analogamente, também definimos a *derivada à direita* $\overleftarrow{\partial}/\partial\eta_i$ trazendo-se a variável η_i à direita até que ela encoste na derivada e então aplicando a regra

$$\eta_i\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial\eta_i} = 1\,.$$

Por exemplo,

$$\frac{\partial}{\partial\eta_i}\eta_j\eta_i = -\eta_j \;\; (i \neq j)\,,$$

e

$$\eta_i\eta_j\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial\eta_i} = -\eta_j \;\; (i \neq j)\,.$$

Agora vamos aplicar as regras de diferenciação para dois casos de interesse. Considere a função

$$E(\bar{\rho},\eta) = e^{\sum_j \bar{\rho}_j\eta_j} = \prod_j (1+\bar{\rho}_j\eta_j)\,,$$

onde $\{\eta_i, \bar{\rho}_i\}$ são os geradores de uma álgebra de Grassmann. Então, usando as regras de diferenciação, temos que

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial\bar{\rho}_i}E(\bar{\rho},\eta) &= \frac{\partial}{\partial\bar{\rho}_i}\prod_j(1+\bar{\rho}_j\eta_j) \\
&= \frac{\partial}{\partial\bar{\rho}_i}(1+\bar{\rho}_i\eta_i)\prod_{j\neq i}(1+\bar{\rho}_j\eta_j) \\
&= \eta_i\prod_{j\neq i}(1+\bar{\rho}_j\eta_j) \\
&= \eta_i(1+\bar{\rho}_i\eta_i)\prod_{j\neq i}(1+\bar{\rho}_j\eta_j) \\
&= \eta_i\prod_j(1+\bar{\rho}_j\eta_j) \\
&= \eta_i\,E(\bar{\rho},\eta)\,. \qquad (3.28)
\end{aligned}$$

Note que no segundo passo foi usada a liberdade que temos para comutar cada termo da produtória, pois cada termo contém apenas pares de variáveis de Grassmann, e não ocorre uma mudança efetiva no sinal ao se comutar um número par delas. Já no quarto passo foi adicionado um termo nulo à igualdade, pois esse termo contém η_i^2. Assim conseguimos obter a forma desejada para o resultado final da diferenciação, que é a mesma expressão

que obteríamos se tivéssemos derivado em relação a variáveis usuais. Isto acontece porque estamos diferenciando uma função exponencial cujo argumento possui apenas uma soma de termos pares de números de Grassmann, sendo que pares de números de Grassmann se comportam como variáveis usuais. Assim, também é fácil notar que

$$\begin{aligned} E(\bar{\eta},\rho)\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial\rho_i} &= e^{\sum_j \bar{\eta}_j\rho_j}\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial\rho_i} \\ &= \bar{\eta}_i E(\bar{\eta},\rho)\,. \end{aligned} \tag{3.29}$$

3.2.2.2 Integração de Grassmann

A integração de Grassmann é definida por apenas duas regras, para as quais deveremos fazer uma breve motivação.[11]

As integrais usuais possuem uma propriedade essencial, que é o fato de podermos transladar a variável muda de integração: $\int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x+c) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x)$. Assim, deveríamos insistir que a integral de Grassmann obedeça à regra $\int d\eta\, A(\eta+\xi) = \int d\eta\, A(\eta)$, onde ξ é um número de Grassmann arbitrário. Assim, considerando $A(\eta) = a + b\eta$, temos

$$\int d\eta\,[(a+b\xi)+b\eta] = \int d\eta\,(a+b\eta)\,.$$

A translação altera o termo constante, mas mantém o termo linear inalterado. De fato, se considerássemos uma função qualquer, novamente chegaríamos à conclusão de que apenas o termo constante é alterado. Portanto, devemos esperar que a integração para termos constantes seja nula, isto é,

$$\int d\eta = 0\,.$$

Agora consideramos a integral $\int d\eta\,(\eta)$. Sabemos que pares de números de Grassmann se comportam como números usuais. Assim, a integral $\int d\eta\,(\eta)$ é apenas um número usual que devemos simplesmente tomar como 1, isto fixa a normalização de $d\eta$. Portanto, chegamos às duas regras simples que definem a integral de Grassmann

$$\begin{aligned} \int d\eta_i &= 0\,, \\ \int d\eta_i\,\eta_i &= 1\,. \end{aligned} \tag{3.30}$$

As medidas de integração $\{d\eta_i\}$ obedecem às relações de anticomutação

$$\{d\eta_i, d\eta_j\} = \{d\eta_i, \eta_j\} = 0\,,\ \ \forall i,j\,. \tag{3.31}$$

Uma observação interessante é que as regras de integração são exatamente as regras de diferenciação (derivada à esquerda), portanto, a integração sobre variáveis de Grassmann tem o mesmo efeito que a diferenciação. Agora usaremos as regras de integração para obter uma solução para as integrais que possuem a forma de funções de correlação fermiônicas. Assim, começamos inicialmente calculando a seguinte integral

$$I[D] = \int \prod_{l=1}^{N} d\bar{\eta}_l d\eta_l\, e^{-\sum_{i,j=1}^{N}\bar{\eta}_i D_{ij}\eta_j} = \int D(\bar{\eta}\eta)\, e^{-\bar{\eta}^T D\eta}\,, \tag{3.32}$$

onde D é uma matriz complexa $N \times N$. Para calcular (3.32), inicialmente escrevemos o integrando como

$$\begin{aligned} e^{-\sum_{i,j=1}^{N} \bar{\eta}_i D_{ij} \eta_j} &= e^{-\bar{\eta}_1 D_{1i_1} \eta_{i_1}} e^{-\bar{\eta}_2 D_{2i_2} \eta_{i_2}} \dots e^{-\bar{\eta}_N D_{Ni_N} \eta_{i_N}} \\ &= (1 - \bar{\eta}_1 D_{1i_1} \eta_{i_1})(1 - \bar{\eta}_2 D_{2i_2} \eta_{i_2}) \dots (1 - \bar{\eta}_N D_{Ni_N} \eta_{i_N}) \,, \end{aligned}$$

onde se subentende uma soma sobre índices repetidos i_l, $l = 1, \dots N$. Agora, devido às regras de integração (3.30), o integrando deve envolver o produto de todas as variáveis de Grassmann. Assim, precisamos considerar o termo

$$\begin{aligned} K(\eta, \bar{\eta}) &= \sum_{i_1,\dots,i_N} (-\bar{\eta}_1 D_{1i_1} \eta_{i_1})(-\bar{\eta}_2 D_{2i_2} \eta_{i_2}) \dots (-\bar{\eta}_N D_{Ni_N} \eta_{i_N}) \\ &= \sum_{i_1,\dots,i_N} \eta_{i_1} \bar{\eta}_1 \eta_{i_2} \bar{\eta}_2 \dots \eta_{i_N} \bar{\eta}_N D_{1i_1} D_{2i_2} \dots D_{Ni_N} \\ &= \eta_1 \bar{\eta}_1 \eta_2 \bar{\eta}_2 \dots \eta_N \bar{\eta}_N \sum_{i_1,\dots,i_N} \epsilon_{i_1 i_2 \dots i_N} D_{1i_1} D_{2i_2} \dots D_{Ni_N} \\ &= \eta_1 \bar{\eta}_1 \eta_2 \bar{\eta}_2 \dots \eta_N \bar{\eta}_N \det D \,, \end{aligned} \tag{3.33}$$

onde as permutações agora são apenas sobre termos com todos os índices diferentes. No segundo passo usamos a propriedade $\bar{\eta}_k \eta_{i_k} = -\eta_{i_k} \bar{\eta}_k$ para eliminar os sinais negativos. No terceiro passo ordenamos as variáveis de Grassmann na sequência crescente de seus índices e por isso introduzimos o tensor ϵ em N dimensões, que tem a função de dar o sinal correto das permutações necessárias para fixar a mesma ordem das variáveis de Grassmann para cada termo da soma. E no quarto passo identificamos a fórmula para o determinante de uma matriz. Assim, para calcular a integral (3.32), podemos substituir seu integrando por (3.33), isto é,

$$I[D] = \left[\prod_{i=1}^{N} \int d\bar{\eta}_i d\eta_i \eta_i \bar{\eta}_i \right] \det D = \det D \,.$$

Concluindo, podemos resumir esse resultado que será importante mais tarde

$$\begin{aligned} \int D(\bar{\eta}\eta)\, e^{-\sum_{i,j=1}^{N} \bar{\eta}_i D_{ij} \eta_j} &= \det D \,, \\ D(\bar{\eta}\eta) &= \prod_{l=1}^{N} d\bar{\eta}_l d\eta_l \,. \end{aligned} \tag{3.34}$$

Existe outra integral importante que precisamos determinar,

$$I_{i_1 \dots i_l i'_1 \dots i'_l}[D] = \int D(\bar{\eta}\eta) \eta_{i_1} \dots \eta_{i_l} \bar{\eta}_{i'_1} \dots \bar{\eta}_{i'_l}\, e^{-\sum_{i,j=1}^{N} \bar{\eta}_i D_{ij} \eta_j} \,. \tag{3.35}$$

Porém, para calcular a integral (3.35) é conveniente introduzir o seguinte funcional gerador

$$Z[\rho, \bar{\rho}] = \int D(\bar{\eta}\eta) e^{-\sum_{i,j=1}^{N} \bar{\eta}_i D_{ij} \eta_j + \sum_{i=1}^{N} (\bar{\eta}_i \rho_i + \bar{\rho}_i \eta_i)} \,, \tag{3.36}$$

onde os números $\{\rho_i\}$ e $\{\bar{\rho}_i\}$ são denominados fontes e também são elementos anticomutantes da álgebra de Grassmann gerada por $\{\eta_i, \bar{\eta}_i, \rho_i, \bar{\rho}_i\}$. A integral (3.35) pode ser escrita

em termos do funcional gerador (3.36). Para isso, basta aplicar derivadas à esquerda e derivadas à direita em relação às fontes para fazer cair os elementos $\eta_{i_k}, \bar{\eta}_{i'_k}$, e em seguida definimos as fontes como sendo nulas. Assim, se observarmos as derivadas que calculamos na seção anterior, isto é, as equações (3.28) e (3.29), podemos notar que a integral (3.35) pode ser escrita em termos do funcional gerador (3.36) como

$$I_{i_1\ldots i_l i'_1\ldots i'_l}[D] = \left[\frac{\partial}{\partial\bar{\rho}_{i_1}}\cdots\frac{\partial}{\partial\bar{\rho}_{i_l}} Z[\rho,\bar{\rho}]\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial\rho_{i'_1}}\cdots\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial\rho_{i'_l}}\right]_{\rho=\bar{\rho}=0} . \tag{3.37}$$

Então, agora determinamos o funcional gerador (3.36). Assim, notamos inicialmente que seu integrando pode ser escrito na forma matricial como

$$K(\eta,\bar{\eta},\rho,\bar{\rho}) = e^{-\bar{\eta}^T D\eta+\bar{\eta}^T\rho+\bar{\rho}^T\eta} . \tag{3.38}$$

Se completarmos o quadrado no expoente, podemos escrevê-lo como

$$-(\bar{\eta}^T - \bar{\rho}^T D^{-1})D(\eta - D^{-1}\rho) + \bar{\rho}^T D^{-1}\rho .$$

Portanto, é conveniente fazermos a seguinte mudança de coordenadas

$$\eta' = \eta - D^{-1}\rho , \tag{3.39a}$$

$$\bar{\eta}'^T = \bar{\eta}^T - \bar{\rho}^T D^{-1} . \tag{3.39b}$$

Além disso, a nova variável η' e $\bar{\eta}'$ é apenas uma translação de η e $\bar{\eta}$, assim, a medida de integração é invariante pela mudança de coordenada, isto é,

$$D(\bar{\eta}\eta) = D(\bar{\eta}'\eta') . \tag{3.40}$$

Deste modo, podemos reescrever o funcional gerador como

$$\begin{aligned} Z[\rho,\bar{\rho}] &= \left(\int D(\bar{\eta}'\eta')e^{-\bar{\eta}'^T D\eta'}\right) e^{\bar{\rho}^T D^{-1}\rho} \\ &= \det D\, e^{\bar{\rho}^T D^{-1}\rho} , \end{aligned} \tag{3.41}$$

onde no segundo passo foi usado o resultado obtido na equação (3.34). Agora retornando à integral (3.35), podemos substituir o funcional gerador (3.41) em (3.37), assim

$$I_{i_1\ldots i_l i'_1\ldots i'_l}[D] = \det D\left[\frac{\partial}{\partial\bar{\rho}_{i_1}}\cdots\frac{\partial}{\partial\bar{\rho}_{i_l}} e^{\bar{\rho}^T D^{-1}\rho}\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial\rho_{i_1}}\cdots\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial\rho_{i_l}}\right]_{\rho=\bar{\rho}=0} . \tag{3.42}$$

Para calcular a expressão acima, é conveniente escrever o diferenciando entre colchetes como

$$e^{\bar{\rho}^T D^{-1}\rho} = (1+\bar{\rho}_{i_1}D^{-1}_{i_1k_1}\rho_{k_1})(1+\bar{\rho}_{i_2}D^{-1}_{i_2k_2}\rho_{k_2})\ldots(1+\bar{\rho}_{i_l}D^{-1}_{i_lk_l}\rho_{k_l})\,[\ldots] , \tag{3.43}$$

onde os índices $k_1,\ldots,k_l$ são somados e $[\ldots]$ corresponde aos termos restantes que não envolvem as variáveis $\bar{\rho}_{i_1},\ldots,\bar{\rho}_{i_l}$. Como os únicos termos que contribuem as derivadas à

esquerda são $\bar{\rho}_{i_1}, \ldots, \bar{\rho}_{i_l}$, então os únicos termos importantes em (3.43) são os que envolvem o produto de todas essas variáveis. Além disso, como tomaremos todas as fontes ρ_i's e $\bar{\rho}_i$'s igual a zero no final, então também podemos substituir $[\ldots]$ por 1. Portanto, é conveniente substituirmos o funcional gerador $Z[\rho, \bar{\rho}]$ em (3.37) por

$$\tilde{Z}[\rho, \bar{\rho}] = \det D \sum_{\{k_i\}'} \bar{\rho}_{i_1} D^{-1}_{i_1 k_1} \rho_{k_1} \ldots \bar{\rho}_{i_l} D^{-1}_{i_l k_l} \rho_{k_l} \tag{3.44}$$

onde todos os k_i's são diferentes e a linha sobre $\{k_i\}'$ indica que todos os k_i's tomam apenas os valores no conjunto $\{i'_1, i'_2, \ldots, i'_l\}$, naturalmente outros valores para k_i não contribuem para as derivadas à direita em (3.42). Agora também podemos reescrever a expressão acima como

$$\tilde{Z}[\rho, \bar{\rho}] = \det D \sum_P D^{-1}_{i_1 i'_{P_1}} D^{-1}_{i_2 i'_{P_2}} \ldots D^{-1}_{i_l i'_{P_l}} \bar{\rho}_{i_1} \rho_{i'_{P_1}} \bar{\rho}_{i_2} \rho_{i'_{P_2}} \ldots \bar{\rho}_{i_l} \rho_{i'_{P_l}} \,, \tag{3.45a}$$

onde a soma se estende sobre todas as permutações

$$P : \begin{pmatrix} i'_1 & i'_2 & \ldots & i'_l \\ i'_{P_1} & i'_{P_2} & \ldots & i'_{P_l} \end{pmatrix} . \tag{3.45b}$$

Além disso, podemos escrever

$$\bar{\rho}_{i_1} \rho_{i'_{P_1}} \bar{\rho}_{i_2} \rho_{i'_{P_2}} \ldots \bar{\rho}_{i_l} \rho_{i'_{P_l}} = \mathrm{sign}(P) \bar{\rho}_{i_1} \rho_{i'_1} \bar{\rho}_{i_2} \rho_{i'_2} \ldots \bar{\rho}_{i_l} \rho_{i'_l} \,, \tag{3.46}$$

onde $\mathrm{sign}(P)$ é o sinal da permutação (3.45b). E novamente também podemos escrever

$$\bar{\rho}_{i_1} \rho_{i'_1} \bar{\rho}_{i_2} \rho_{i'_2} \ldots \bar{\rho}_{i_l} \rho_{i'_l} = \xi_l \, \bar{\rho}_{i_l} \ldots \bar{\rho}_{i_2} \bar{\rho}_{i_1} \rho_{i'_l} \ldots \rho_{i'_2} \rho_{i'_1} \,, \tag{3.47}$$

onde $\xi_l = (-1)^{l(l-1)/2}$ considera o sinal obtido das permutações realizadas para rearranjar os termos ρ_i's e $\bar{\rho}_i$'s na ordem desejada, isto é, na ordem em que podemos aplicar diretamente as derivadas à esquerda e derivadas à direita em (3.37). Assim, finalmente chegamos à expressão conveniente para o funcional gerador

$$\tilde{Z}[\rho, \bar{\rho}] = \xi_l \det D \left[\sum_P \mathrm{sign}(P) D^{-1}_{i_1 i'_{P_1}} D^{-1}_{i_2 i'_{P_2}} \ldots D^{-1}_{i_l i'_{P_l}} \right] \bar{\rho}_{i_l} \ldots \bar{\rho}_{i_2} \bar{\rho}_{i_1} \rho_{i'_l} \ldots \rho_{i'_2} \rho_{i'_1} \,. \tag{3.48}$$

E agora podemos substituir $\tilde{Z}[\rho, \bar{\rho}]$ em (3.37) para obter o resultado da integral (3.35), isto é,

$$\begin{aligned} \int D(\bar{\eta}\eta) \eta_{i_1} \ldots \eta_{i_l} \bar{\eta}_{i'_1} \ldots \bar{\eta}_{i'_l} e^{-\sum_{i,j=1}^N \bar{\eta}_i D_{ij} \eta_j} \\ = (-1)^{l(l-1)/2} \det D \sum_P \mathrm{sign}(P) D^{-1}_{i_1 i'_{P_1}} D^{-1}_{i_2 i'_{P_2}} \ldots D^{-1}_{i_l i'_{P_l}} \,. \end{aligned} \tag{3.49}$$

Apesar de a expressão acima não ter uma forma simples e de fácil memorização, existe um método conveniente que podemos usar para escrevê-la ou, mais precisamente, para

escrever as funções de correlação que serão definidas agora. Assim, inicialmente definimos a função de correlação mais simples possível, isto é, a função de correlação de 2 pontos

$$\langle \eta_i \bar{\eta}_j \rangle = \frac{\int D(\bar{\eta}\eta)\, \eta_i \bar{\eta}_j\, e^{-\sum_{i,j=1}^{N} \bar{\eta}_i D_{ij} \eta_j}}{\int D(\bar{\eta}\eta)\, e^{-\sum_{i,j=1}^{N} \bar{\eta}_i D_{ij} \eta_j}} \,. \tag{3.50}$$

De (3.34), temos que $\int D(\bar{\eta}\eta) e^{-\sum_{i,j=1}^{N} \bar{\eta}_i D_{ij} \eta_j} = \det D$. E da equação (3.49), temos que $\int D(\bar{\eta}\eta) \eta_i \bar{\eta}_j e^{-\sum_{i,j=1}^{N} \bar{\eta}_i D_{ij} \eta_j} = \det D D^{-1}_{ij}$ (para o caso $l = 1$ e $i_1 = i, i'_1 = j$). Portanto, a função de correlação de 2 pontos é dada por

$$\eta_i \bar{\eta}_j \equiv \langle \eta_i \bar{\eta}_j \rangle = D^{-1}_{ij} \,, \tag{3.51}$$

à qual iremos nos referir como uma *contração*.

Antes de introduzirmos uma função de correlação mais geral, ainda devemos definir a função de correlação de 4 pontos:

$$\langle \eta_i \eta_j \bar{\eta}_k \bar{\eta}_l \rangle = \frac{\int D(\bar{\eta}\eta) \eta_i \eta_j \bar{\eta}_k \bar{\eta}_l e^{-\sum_{i,j=1}^{N} \bar{\eta}_i D_{ij} \eta_j}}{\int D(\bar{\eta}\eta) e^{-\sum_{i,j=1}^{N} \bar{\eta}_i D_{ij} \eta_j}} \,, \tag{3.52}$$

que nos ajudará a entender o método que será mais simples para obter o resultado das funções de correlação. A partir das equações (3.34) e (3.49) podemos determinar facilmente o resultado da função de correlação de 4 pontos, a saber,

$$\begin{aligned} \langle \eta_i \eta_j \bar{\eta}_k \bar{\eta}_l \rangle &= \eta_i \eta_j \bar{\eta}_k \bar{\eta}_l + \eta_i \eta_j \bar{\eta}_k \bar{\eta}_l \\ &= D^{-1}_{il} D^{-1}_{jk} - D^{-1}_{ik} D^{-1}_{jl} \,. \end{aligned} \tag{3.53}$$

Note que o resultado pode ser obtido realizando a soma de todas as possíveis contrações emparelhadas das variáveis de Grassmann, multiplicada por um fator $(-1)^p$, onde p é o número de transposições necessárias para colocar as variáveis contraídas próximas aos seus respectivos pares na forma $\eta\bar{\eta}$. Observe que em (3.53), no primeiro termo à direita podemos permutar $\bar{\eta}_l$ com $\eta_j \bar{\eta}_k$, dando $p = 2$ e um sinal positivo desse termo na segunda linha. Já no segundo termo à direita podemos permutar η_j com $\bar{\eta}_k$, dando $p = 1$ e um sinal negativo desse termo na segunda linha. Usando esse método se torna bem mais simples escrever qualquer função de correlação para variáveis de Grassmann.

Agora podemos generalizar as funções de correlação (3.50) e (3.52) por

$$\langle \eta_{i_1} \ldots \eta_{i_l} \bar{\eta}_{i'_1} \ldots \bar{\eta}_{i'_l} \rangle = \frac{\int D(\bar{\eta}\eta) \eta_{i_1} \ldots \eta_{i_l} \bar{\eta}_{i'_1} \ldots \bar{\eta}_{i'_l} e^{-\sum_{i,j=1}^{N} \bar{\eta}_i D_{ij} \eta_j}}{\int D(\bar{\eta}\eta) e^{-\sum_{i,j=1}^{N} \bar{\eta}_i D_{ij} \eta_j}} \,. \tag{3.54}$$

E naturalmente levando em consideração nossa discussão acima, a função de correlação de n pontos ($n = 2l$) é dada por

$$\langle \eta_{i_1} \ldots \eta_{i_l} \bar{\eta}_{i'_1} \ldots \bar{\eta}_{i'_l} \rangle = \eta_{i_1} \ldots \eta_{i_l} \bar{\eta}_{i'_1} \ldots \bar{\eta}_{i'_l} + \eta_{i_1} \ldots \eta_{i_l} \bar{\eta}_{i'_1} \ldots \bar{\eta}_{i'_l} + \ldots \,. \tag{3.55}$$

Isto completa nossa discussão sobre a álgebra de Grassmann.

Na próxima seção estaremos preocupados com o cálculo de funções de correlação fermiônicas. Neste caso as variáveis de Grassmann η_i's e $\bar{\eta}_i$'s se tornarão os campos de Dirac na rede e a matriz D será o assim chamado operador de Dirac. A partir da fórmula (3.55), podemos notar que o cálculo de qualquer função de correlação fermiônica se resume basicamente em determinar o operador de Dirac D e invertê-lo. Contudo, como veremos ao estudar o espectro de hádrons, a inversão do operador de Dirac possui certas dificuldades e tem um custo computacional alto.

4 FÉRMION LIVRE NA REDE

Nessa seção estaremos preocupados em calcular o *propagador fermiônico* para o campo livre de Dirac, isto é, a função de correlação de 2 pontos para um férmion livre. Contudo, as funções de correlação fermiônicas (3.23b) estão apenas formalmente definidas, pois a variável x na medida de integração é uma variável contínua. Assim, para darmos um significado preciso às integrais de trajetória, somos forçados a discretizar não apenas o tempo, mas também o espaço, isto é, somos forçados a introduzir uma *rede no espaço-tempo*. Ao final, será necessário remover esta estrutura da rede. Isso não é uma tarefa trivial, pois, como será visto na seção 4.2, vamos nos deparar com o problema de dublês de férmions. Uma possível solução para o problema dos dublês será vista na seção 4.3: os chamados férmions de Wilson.[9,12]

Apesar de a introdução da rede parecer apenas necessária para dar um significado preciso às integrais de trajetória, ela tem uma importância ainda maior: ela atua como um regularizador da teoria quântica de campos. O programa de renormalização na rede contém duas etapas. A primeira etapa consiste em introduzir uma rede no espaço-tempo, no cálculo da integral de trajetória. Esta regularização corresponde a definir um significado à integral de trajetória. A segunda etapa do programa de renormalização corresponde a remover a estrutura da rede. Isto equivale a estudar o limite do contínuo. Portanto, os parâmetros básicos da teoria deverão ser ajustados ao espaçamento da rede de uma dada maneira, que dependerá em geral da dinâmica, de modo que os observáveis físicos não dependam da estrutura da rede.

O conteúdo deste capítulo é baseado principalmente no Capítulo 4 do livro texto de H.J. Rothe[9] e nos Capítulos 2, 5 e 7 do livro texto de C. Gattringer e C. Lang.[12] Alguns resultados obtidos no capítulo anterior também são utilizados.

4.1 Discretização Ingênua de Férmions

Agora que entendemos a importância da introdução de uma rede no espaço-tempo, então deveremos fazer a formulação da rede da integral de trajetória. Assim, inicialmente introduzimos a rede quadridimensional Λ:

$$\Lambda = \{n = (n_1, n_2, n_3, n_4) | n_1, n_2, n_3 = 0, 1, \ldots, N-1; n_4 = 0, 1, \ldots N_T - 1\} \ . \tag{4.1}$$

Os vetores $n \in \Lambda$ marcam os pontos do espaço-tempo separados por um espaçamento de rede a. Os campos fermiônicos ψ e $\bar{\psi}$ são colocados apenas nos pontos da rede, assim, os graus de liberdade fermiônicos são

$$\psi(n) \ , \ \bar{\psi}(n) \ , \ \ n \in \Lambda \, . \tag{4.2}$$

Para o caso do campo livre de Dirac os campos deverão possuir um índice de Dirac. Note que por conveniência notacional foram usados apenas os valores inteiros das coordenadas n (com quatro componentes) para marcar as posições dos férmions, e não o verdadeiro ponto do espaço tempo $x = na$. A medida de integração que aparece na função de Green euclidiana (3.23b) é dada por

$$D\bar{\psi}D\psi = \prod_{\alpha,n\in\Lambda} d\bar{\psi}_\alpha(n) \prod_{\beta,m\in\Lambda} d\psi_\beta(m)\,. \tag{4.3}$$

A seguir deveremos reescrever a função de correlação (3.23b) em termos das variáveis de rede adimensionais. Assim, basta notar que M tem dimensão do inverso do espaçamento da rede, então podemos usar uma variável adimensional $\hat{M}$, tal que, $\hat{M} = aM$. Naturalmente, seguindo essa ideia é conveniente fazermos as seguintes substituições

$$\begin{aligned} M &\to \frac{1}{a}\hat{M}\,, \\ \psi_\alpha(x) &\to \frac{1}{a^{3/2}}\hat{\psi}_\alpha(n)\,, \\ \bar{\psi}_\alpha(x) &\to \frac{1}{a^{3/2}}\hat{\bar{\psi}}_\alpha(n)\,, \\ \partial_\mu\psi_\alpha(x) &\to \frac{1}{a^{5/2}}\hat{\partial}_\mu\hat{\psi}_\alpha(n)\,. \end{aligned} \tag{4.4}$$

Agora precisamos apenas escolher como discretizar o operador diferencial ∂_μ. Na *discretização ingênua de férmions*, escolhemos discretizar a derivada da rede simetricamente

$$\hat{\partial}_\mu\hat{\psi}_\alpha(n) = \frac{\hat{\psi}_\alpha(n+\hat{\mu}) - \hat{\psi}_\alpha(n-\hat{\mu})}{2}\,. \tag{4.5}$$

Note que $\hat{\partial}_\mu = a\partial_\mu$. Agora podemos escrever a ação do campo livre de Dirac na rede como

$$S_F^0\left[\hat{\psi},\hat{\bar{\psi}}\right] = \sum_{n\in\Lambda}\hat{\bar{\psi}}(n)\left(\sum_{\mu=1}^{4}\gamma_\mu\frac{\hat{\psi}(n+\hat{\mu}) - \hat{\psi}(n-\hat{\mu})}{2} + \hat{M}\hat{\psi}(n)\right)\,. \tag{4.6}$$

Como a ação é bilinear em $\bar{\psi}$ e ψ, podemos escrevê-la na forma

$$S_F^0\left[\hat{\psi},\hat{\bar{\psi}}\right] = \sum_{n,m\in\Lambda}\sum_{\alpha,\beta}\hat{\bar{\psi}}(n)_\alpha D(n|m)_{\alpha\beta}\hat{\psi}(m)_\beta\,, \tag{4.7}$$

onde o operador de Dirac ingênuo na rede é dado por

$$D(n|m)_{\alpha\beta} = \sum_{\mu=1}^{4}(\gamma_\mu)_{\alpha\beta}\frac{\delta_{n+\hat{\mu},m} - \delta_{n-\hat{\mu},m}}{2} + \hat{M}\delta_{\alpha\beta}\delta_{n,m}\,. \tag{4.8}$$

E, por fim, as funções de correlação fermiônicas na rede são dadas por

$$\langle\hat{\psi}_\alpha(n)\ldots\hat{\bar{\psi}}_\beta(m)\ldots\rangle = \frac{\int D\hat{\bar{\psi}}D\hat{\psi}(\hat{\psi}_\alpha(n)\ldots\hat{\bar{\psi}}_\beta(m)\ldots)\mathrm{e}^{-S_F^0\left[\hat{\psi},\hat{\bar{\psi}}\right]}}{\int D\hat{\bar{\psi}}D\hat{\psi}\mathrm{e}^{-S_F^0\left[\hat{\psi},\hat{\bar{\psi}}\right]}}\,, \tag{4.9}$$

onde a medida de integração é definida como

$$D\hat{\bar{\psi}}D\hat{\psi} = \prod_{\alpha,n\in\Lambda} d\hat{\bar{\psi}}_\alpha(n) \prod_{\beta,m\in\Lambda} d\hat{\psi}_\beta(m)\,. \tag{4.10}$$

4.2 O Problema dos Dublês de Férmions

A função de correlação mais simples é a função de 2 pontos. Ela também é denominada propagador fermiônico. Usando os resultados da seção de álgebra de Grassmann [veja equação (3.51)], podemos escrever a função de correlação de 2 pontos como

$$\begin{aligned}
\langle \hat{\psi}_\alpha(n)\hat{\bar{\psi}}_\beta(m)\rangle &= \frac{\int D\hat{\bar{\psi}}D\hat{\psi}(\hat{\psi}_\alpha(n)\hat{\bar{\psi}}_\beta(m))\mathrm{e}^{-S_F^0\left[\hat{\psi},\hat{\bar{\psi}}\right]}}{\int D\hat{\bar{\psi}}D\hat{\psi}\mathrm{e}^{-S_F^0\left[\hat{\psi},\hat{\bar{\psi}}\right]}} \\
\langle \hat{\psi}_\alpha(n)\hat{\bar{\psi}}_\beta(m)\rangle &= D(n|m)^{-1}_{\alpha\beta}\,. \qquad (4.11)
\end{aligned}$$

A função de correlação de 2 pontos é simplesmente o operador de Dirac inverso. Para determinarmos o operador de Dirac inverso é conveniente trabalharmos no espaço de momentos, isto é, devemos fazer a transformada de Fourier de rede*. Assim, começamos escrevendo

$$\delta_{n,m} = \delta(n-m) = \frac{1}{|\Lambda|}\sum_{p\in\tilde{\Lambda}} e^{i\hat{p}\cdot(n-m)}\,,$$

e então,

$$\begin{aligned}
D(n|m)_{\alpha\beta} &= \sum_{\mu=1}^{4}(\gamma_\mu)_{\alpha\beta}\frac{\delta_{n+\hat{\mu},m}-\delta_{n-\hat{\mu},m}}{2} + \hat{M}\delta_{\alpha\beta}\delta_{n,m} \\
&= \frac{1}{|\Lambda|}\sum_{p\in\tilde{\Lambda}}\left[\sum_{\mu=1}^{4}(\gamma_\mu)_{\alpha\beta}\frac{e^{i\hat{p}\cdot(n+\hat{\mu}-m)}-e^{i\hat{p}\cdot(n-\hat{\mu}-m)}}{2} + \hat{M}\delta_{\alpha\beta}e^{i\hat{p}\cdot(n-m)}\right] \\
&= \frac{1}{|\Lambda|}\sum_{p\in\tilde{\Lambda}}\left[i\sum_{\mu=1}^{4}(\gamma_\mu)_{\alpha\beta}\sin(\hat{p}\cdot\hat{\mu}) + \hat{M}\delta_{\alpha\beta}\right]e^{i\hat{p}\cdot(n-m)} \\
D(n|m)_{\alpha\beta} &= \frac{1}{|\Lambda|}\sum_{p\in\tilde{\Lambda}}\tilde{D}(\hat{p})_{\alpha\beta}e^{i\hat{p}\cdot(n-m)}\,, \qquad (4.12)
\end{aligned}$$

onde $\tilde{D}(\hat{p})_{\alpha\beta}$ é

$$\tilde{D}(\hat{p})_{\alpha\beta} = i\sum_{\mu=1}^{4}(\gamma_\mu)_{\alpha\beta}\sin(\hat{p}_\mu) + \hat{M}\delta_{\alpha\beta}\,. \qquad (4.13)$$

Além disso,

$$D(n|m)^{-1}_{\alpha\beta} = \frac{1}{|\Lambda|}\sum_{p\in\tilde{\Lambda}}\tilde{D}(\hat{p})^{-1}_{\alpha\beta}e^{i\hat{p}\cdot(n-m)}\,, \qquad (4.14)$$

* Veja o Apêndice B.

onde $\tilde{D}(\hat{p})^{-1}_{\alpha\beta}$ é

$$\begin{aligned}
\tilde{D}(\hat{p})^{-1}_{\alpha\beta} &= \frac{1}{\tilde{D}(\hat{p})_{\alpha\beta}} \\
&= \frac{1}{i\sum_{\mu=1}^{4}(\gamma_\mu)_{\alpha\beta}\sin(\hat{p}_\mu)+\hat{M}\delta_{\alpha\beta}} \\
&= \frac{-i\sum_{\mu=1}^{4}(\gamma_\mu)_{\alpha\beta}\sin(\hat{p}_\mu)+\hat{M}\delta_{\alpha\beta}}{\sum_{\mu,\nu=1}^{4}(\gamma_\mu)_{\alpha\beta}(\gamma_\nu)_{\alpha\beta}\sin(\hat{p}_\mu)\sin(\hat{p}_\nu)+\hat{M}^2\delta_{\alpha\beta}\delta_{\alpha\beta}} \\
&= \frac{-i\sum_{\mu=1}^{4}(\gamma_\mu)_{\alpha\beta}\sin(\hat{p}_\mu)+\hat{M}\delta_{\alpha\beta}}{\sum_{\mu,\nu=1}^{4}\frac{1}{2}\left[(\gamma_\mu)_{\alpha\beta}(\gamma_\nu)_{\alpha\beta}+(\gamma_\nu)_{\alpha\beta}(\gamma_\mu)_{\alpha\beta}\right]\sin(\hat{p}_\mu)\sin(\hat{p}_\nu)+\hat{M}^2\delta_{\alpha\beta}} \\
&= \frac{-i\sum_{\mu=1}^{4}(\gamma_\mu)_{\alpha\beta}\sin(\hat{p}_\mu)+\hat{M}\delta_{\alpha\beta}}{\sum_{\mu,\nu=1}^{4}(\delta_{\mu\nu})_{\alpha\beta}\sin(\hat{p}_\mu)\sin(\hat{p}_\nu)+\hat{M}^2\delta_{\alpha\beta}}\,.
\end{aligned}$$

Portanto, podemos escrever o operador de Dirac inverso no espaço de momento por

$$\tilde{D}(\hat{p})^{-1}_{\alpha\beta} = \frac{\left[-i\sum_{\mu=1}^{4}\gamma_\mu\sin(\hat{p}_\mu)+\hat{M}\right]_{\alpha\beta}}{\sum_{\mu=1}^{4}\sin^2(\hat{p}_\mu)+\hat{M}^2}\,. \tag{4.15}$$

Assim, a função de correlação de 2 pontos (4.14) é dada por

$$D(n|m)^{-1}_{\alpha\beta} = \frac{1}{|\Lambda|}\sum_{p\in\tilde{\Lambda}}\frac{\left[-i\sum_{\mu=1}^{4}\gamma_\mu\sin(\hat{p}_\mu)+\hat{M}\right]_{\alpha\beta}}{\sum_{\mu=1}^{4}\sin^2(\hat{p}_\mu)+\hat{M}^2}e^{i\hat{p}\cdot(n-m)}\,. \tag{4.16}$$

Agora devemos calcular a função de correlação física $\langle\psi_\alpha(x)\bar{\psi}_\beta(y)\rangle$, isto é, o propagador fermiônico. Assim, devemos fazer as seguintes substituições

$$\begin{aligned}
\hat{p} &\to pa \\
\hat{M} &\to Ma \\
n &\to x/a \\
m &\to y/a\,,
\end{aligned}$$

onde $a \to 0$. Então finalmente obtemos o propagador fermiônico

$$\langle\psi_\alpha(x)\bar{\psi}_\beta(y)\rangle = \lim_{a\to 0}\frac{1}{|\Lambda|}\sum_{p\in\tilde{\Lambda}}\frac{\left[-i\sum_{\mu=1}^{4}\gamma_\mu\frac{\sin(p_\mu a)}{a}+M\right]_{\alpha\beta}}{\sum_{\mu=1}^{4}\frac{\sin^2(p_\mu a)}{a^2}+M^2}e^{ip\cdot(x-y)}\,. \tag{4.17}$$

De acordo com a equação (3.55), o propagador fermiônico governa o comportamento das funções de n pontos e, portanto, é importante o analisarmos. Para férmions livres podemos estudar o propagador no espaço de momentos simplesmente. De interesse particular é o caso de férmions de massa nula, isto é, $M = 0$. Assim, vamos ver o limite do contínuo ingênuo de $\tilde{D}(p)^{-1}_{\alpha\beta}$ (4.15),

$$\tilde{D}(p)^{-1}_{\alpha\beta}\Big|_{M=0} = \frac{\left[-i\sum_{\mu=1}^{4}\gamma_\mu\frac{\sin(p_\mu a)}{a}\right]_{\alpha\beta}}{\sum_{\mu=1}^{4}\frac{\sin^2(p_\mu a)}{a^2}} \xrightarrow{a\to 0} \frac{\left[-i\sum_{\mu=1}^{4}\gamma_\mu p_\mu\right]_{\alpha\beta}}{p^2}\,. \tag{4.18}$$

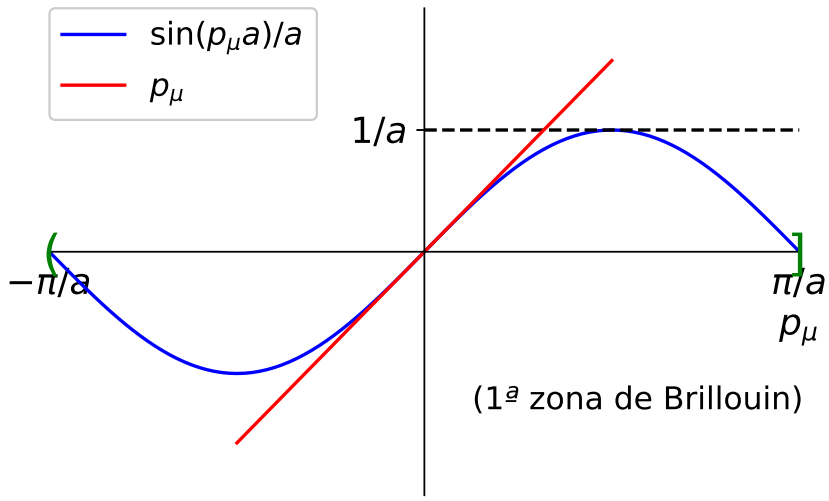

Figura 2 – Dublês de férmions.

Fonte: Elaborada pelo autor.

No contínuo, o propagador no espaço de momentos para férmions de massa nula [lado direito de (4.18)] tem apenas um polo em

$$p = (0, 0, 0, 0)\,. \tag{4.19}$$

Este polo corresponde a um único férmion que é descrito por um operador de Dirac contínuo. Na rede a situação é diferente. O propagador de férmions livres [no centro de (4.18)] tem polos adicionais: sempre que todas as componentes são $p_\mu = 0$ ou $p_\mu = \pi/a$, encontramos um polo. A ilustração dessa situação pode ser vista na Figura 2. O espaço de momentos contém todos os momentos $p_\mu \in (-\pi/a, \pi/a]$, com $-\pi/a$ e π/a identificados, e não podemos simplesmente excluir os valores $p_\mu = \pi/a$. Deste modo, o operador de Dirac tem polos não físicos em

$$p = (\pi/a, 0, 0, 0)\ ,\ (0, \pi/a, 0, 0)\ , \ldots ,\ (\pi/a, \pi/a, \pi/a, \pi/a)\,. \tag{4.20}$$

Isto da origem a 15 polos indesejáveis, o então chamado *dublês de férmions*. A seguir deveremos discutir uma maneira de remover os dublês da teoria.

4.3 Férmions de Wilson

Existem muitas ações na rede que têm o mesmo limite do contínuo ingênuo, ou seja, o mesmo limite da ação $S_F^0[\psi, \bar{\psi}]$ [veja equação (4.7)]. De fato, sempre podemos adicionar um termo em $S_F^0[\psi, \bar{\psi}]$ que desapareça no limite do contínuo. Assim, devemos explorar essa ambiguidade para removermos os dublês de férmions. Contudo, gostaríamos

que a ação continue sendo bilinear em $\bar{\psi}$ e ψ, portanto, adicionar um termo na ação é equivalente a adicionar um termo no operador de Dirac ingênuo. Como os dublês de férmions estão relacionados com o operador de Dirac no espaço de momentos, então é ainda mais conveniente adicionarmos um termo que dependa do momento no operador de Dirac no espaço de momentos e analisarmos o seu efeito, e naturalmente estaremos preocupados em encontrar um termo que consiga remover os dublês de férmions.

O propagador no espaço de momentos (4.18) possui apenas um polo físico, isto é, com todos os $p_\mu = 0$. Os dublês contêm componentes de momentos $p_\mu = \pi/a$. Portanto, seria conveniente encontrarmos algum termo que remova todos os polos não físicos do propagador no espaço de momentos, mas que ao mesmo tempo esse termo seja nulo quando todas as componentes de momento sejam nulas. E que ainda esse termo desapareça no limite do contínuo. Um termo com essas características foi encontrado por Wilson. Ele propôs um termo extra, tal que o operador de Dirac no espaço de momentos [veja equação (4.15)] se torna

$$\tilde{D}(p) = \frac{i}{a}\sum_{\mu=1}^{4}\gamma_\mu \sin(p_\mu a) + M\mathbb{1} + \frac{1}{a}\sum_{\mu=1}^{4}\left[1-\cos(p_\mu a)\right]\mathbb{1}\,. \tag{4.21}$$

Observando a equação (4.21), podemos notar que o termo extra de Wilson atua como um termo adicional de massa. Assim, podemos escrever a nova massa por

$$M(p) = M + \frac{1}{a}\sum_{\mu=1}^{4}\left[1-\cos(p_\mu a)\right]\,, \tag{4.22}$$

e naturalmente a massa total permanece inalterada no polo físico, isto é, $M(0) = M$, enquanto a massa dos dublês é dada por

$$M + \frac{2l}{a}\,, \tag{4.23}$$

onde l é o número de componentes de momento com $p_\mu = \pi/a$. No limite $a \to 0$ os dublês se tornam muito pesados e desacoplam da teoria, portanto a nova ação de Wilson mantém o mesmo limite do contínuo ingênuo. Agora para notarmos que a nova ação de Wilson remove todos os polos indesejáveis do propagador fermiônico, basta escrevermos o operador de Dirac inverso no espaço de momentos em termos da nova massa, isto é,

$$\tilde{D}(p)^{-1}_{\alpha\beta} = \frac{\left[-i\sum_{\mu=1}^{4}\gamma_\mu\frac{\sin(p_\mu a)}{a} + M(p)\right]_{\alpha\beta}}{\sum_{\mu=1}^{4}\frac{\sin^2(p_\mu a)}{a^2} + M(p)^2}\,. \tag{4.24}$$

Se fizermos o limite $M \to 0$, então $M(p) = 0$ se todas as componentes de $p_\mu = 0$, mantendo o polo físico. E para o caso dos dublês, se fizermos o limite $M \to 0$, então $M(p) = 2l/a$, como acima. Assim, esse termo extra $2l/a$ na massa remove todos os polos indesejáveis. Desta forma, o termo extra de Wilson resolve o problema dos dublês de férmions.

Para o caso de um férmion livre, a forma do termo de Wilson no espaço de posições pode ser encontrada pela transformada de Fourier inversa do último termo em (4.21). Assim, o termo de Wilson no espaço de posições é dado por

$$-a\sum_{\mu=1}^{4}\frac{\delta_{n+\hat{\mu},m}-2\delta_{n,m}+\delta_{n-\hat{\mu},m}}{2a^2}\,. \tag{4.25}$$

Vemos que o termo de Wilson é uma discretização de $-(a/2)\partial_\mu\partial_\mu$, isto é, proporcional ao negativo do operador de Laplace[†]. O pré-fator a mostra que o termo de Wilson desaparece no limite do contínuo ingênuo $a \to 0$. Podemos combinar o termo de Wilson (4.25) com o operador de Dirac ingênuo (4.8) para obter o operador de Dirac completo de Wilson. Usando uma notação compacta ele se lê

$$D^{(0)}(n|m)_{\alpha\beta} = -\frac{1}{2a}\sum_{\mu=\pm1}^{\pm4}(1-\gamma_\mu)_{\alpha\beta}\delta_{n+\hat{\mu},m} + \left(M+\frac{4}{a}\right)\delta_{\alpha\beta}\delta_{n,m}\,, \tag{4.26}$$

onde definimos

$$\gamma_{-\mu} = -\gamma_\mu \quad , \quad \mu = 1,2,3,4\,. \tag{4.27}$$

Assim, a ação na rede para um férmion livre é dada por

$$S_F^0\left[\psi,\bar{\psi}\right] = a^4\sum_{n,m\in\Lambda}\sum_{\alpha,\beta}\bar{\psi}(n)_\alpha D^{(0)}(n|m)_{\alpha\beta}\psi(m)_\beta\,. \tag{4.28}$$

4.4 Simetria Quiral

A simetria quiral e sua quebra espontânea são propriedades centrais da QCD com implicações fenomenológicas importantes. Elas explicam porque píons tem massas inesperadamente pequenas e porque não vemos massas degeneradas para parceiros de paridade no espectro hadrônico de baixa energia. Assim, a simetria quiral, e o mecanismo para sua quebra, é de grande relevância em QCD. Contudo, apesar da formulação de férmions de Wilson remover todos os dublês de férmions, ela quebra explicitamente a simetria quiral que a teoria original possui para férmions de massa nula. Este é um problema que sempre acontece ao tentarmos eliminar o problema dos dublês de férmions e garantir o correto limite do contínuo. De fato, a simetria quiral na rede precisa ser reescrita de uma maneira que se possa estudar a quebra de simetria quiral na rede. Assim, a seguir descreveremos a simetria quiral no contínuo e como modificar sua expressão na rede.

4.4.1 Simetria Quiral no Continuo

Para estudarmos a simetria quiral é conveniente introduzirmos a matriz quiral γ_5[‡]:

$$\gamma_5 \equiv \gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4\,. \tag{4.29}$$

† Fazendo expansão de Taylor, temos $[f(x+\epsilon)-2f(x)+f(x-\epsilon)]/\epsilon^2 = f''(x)+\mathcal{O}(\epsilon^2)$.

‡ Veja as propriedades básicas das matrizes gama no apêndice A.

A simetria quiral é uma propriedade de invariância que uma ação possui sob uma *rotação quiral* dos campos fermiônicos

$$\psi \to \psi' = e^{i\alpha\gamma_5}\psi\,, \quad \bar{\psi} \to \bar{\psi}' = \bar{\psi}e^{i\alpha\gamma_5}\,, \tag{4.30}$$

onde α é um parâmetro real. A partir de (3.21), temos que a densidade de lagrangiana do campo livre de Dirac é dada por

$$\mathcal{L}(\psi, \bar{\psi}) = \bar{\psi}\left(\gamma_\mu\partial_\mu + M\right)\psi\,. \tag{4.31}$$

Então, realizando a rotação quiral dos campos, obtemos

$$\mathcal{L}(\psi', \bar{\psi}') = \bar{\psi}e^{i\alpha\gamma_5}\left(\gamma_\mu\partial_\mu + M\right)e^{i\alpha\gamma_5}\psi = \bar{\psi}\left(\gamma_\mu\partial_\mu + Me^{2i\alpha\gamma_5}\right)\psi\,. \tag{4.32}$$

O fator exponencial ao lado da massa é obtido diretamente já que as matrizes gama não atuam na massa. No entanto, para ver por que as exponenciais desaparecem quando atuam no primeiro termo da lagrangiana basta notar que

$$\begin{aligned} e^{i\alpha\gamma_5}\gamma_\mu e^{i\alpha\gamma_5} &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(i\alpha)^n}{n!}e^{i\alpha\gamma_5}\gamma_\mu\gamma_5^n = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-i\alpha)^n}{n!}e^{i\alpha\gamma_5}\gamma_5^n\gamma_\mu = e^{i\alpha\gamma_5}e^{-i\alpha\gamma_5}\gamma_\mu\,, \\ &= \gamma_\mu\,, \end{aligned}$$

onde

$$\gamma_\mu\gamma_5^n = (-1)^n\gamma_5^n\gamma_\mu\,, \quad (n = 0, 1, 2, \ldots)$$

vem da propriedade de anticomutação das matrizes gama. Comparando as equações (4.31) e (4.32), vemos que a lagrangiana é invariante quando a massa fermiônica é nula, isto é,

$$\mathcal{L}(\psi', \bar{\psi}') = \mathcal{L}(\psi, \bar{\psi})\,, \quad \text{se } M = 0\,. \tag{4.33}$$

A simetria quiral desacopla a ação de férmions destros e canhotos de massa nula. Para ver isso devemos introduzir os projetores destro e canhoto, respectivamente

$$P_R = \frac{\mathbb{1} + \gamma_5}{2}\,, \quad P_L = \frac{\mathbb{1} - \gamma_5}{2}\,, \tag{4.34}$$

que obedecem

$$\begin{gathered} P_R^2 = P_R\,, \quad P_L^2 = P_L\,, \quad P_RP_L = P_LP_R = 0\,, \quad P_R + P_L = \mathbb{1}\,, \\ \gamma_\mu P_L = P_R\gamma_\mu\,, \quad \gamma_\mu P_R = P_L\gamma_\mu\,. \end{gathered} \tag{4.35}$$

Podemos definir os campos destro e canhoto usando os projetores

$$\psi_R = P_R\psi\,, \quad \psi_L = P_L\psi\,, \quad \bar{\psi}_R = \bar{\psi}P_L\,, \quad \bar{\psi}_L = \bar{\psi}P_R\,. \tag{4.36}$$

Para ver que os campos desacoplam basta notar que, se $M = 0$,

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(\psi, \bar{\psi}) &= \bar{\psi}\gamma_\mu\partial_\mu\psi = \bar{\psi}(P_R + P_L)\gamma_\mu\partial_\mu(P_R + P_L)\psi\,, \\
&= \bar{\psi}P_R\gamma_\mu\partial_\mu P_R\psi + \bar{\psi}P_R\gamma_\mu\partial_\mu P_L\psi + \bar{\psi}P_L\gamma_\mu\partial_\mu P_R\psi + \bar{\psi}P_L\gamma_\mu\partial_\mu P_L\psi\,, \\
&= \bar{\psi}\gamma_\mu\partial_\mu P_L P_R\psi + \bar{\psi}_L\gamma_\mu\partial_\mu\psi_L + \bar{\psi}_R\gamma_\mu\partial_\mu\psi_R + \bar{\psi}\gamma_\mu\partial_\mu P_R P_L\psi\,, \\
&= \bar{\psi}_L\gamma_\mu\partial_\mu\psi_L + \bar{\psi}_R\gamma_\mu\partial_\mu\psi_R\,, \\
&= \bar{\psi}_L D\psi_L + \bar{\psi}_R D\psi_R\,. \qquad (4.37)
\end{aligned}$$

Assim, encontramos que as componentes destra e canhota não se misturam. Um termo de massa, contudo, mistura as componentes:

$$M\bar{\psi}\psi = M\left(\bar{\psi}_R\psi_L + \bar{\psi}_L\psi_R\right)\,. \qquad (4.38)$$

Já que a simetria quiral da ação é apenas válida para férmions de massa nula, o limite de massa fermiônica nula é conhecido como o *limite quiral*.

A simetria quiral pode ser resumida pela equação

$$D\gamma_5 + \gamma_5 D = 0\,. \qquad (4.39)$$

Ela expressa o fato que o operador de Dirac de massa nula $D = \gamma_\mu\partial_\mu$ anticomuta com γ_5.

4.4.2 Simetria Quiral na Rede

Ao analisarmos o operador de Dirac completo de Wilson (4.26), encontramos que (4.39) é violado mesmo para férmions de massa nula. O responsável é o termo de Wilson (4.25) que tínhamos adicionado na ação ingênua para remover os dublês de férmions. Para ver isso basta notar que o segundo termo de (4.25) envolve apenas uma delta que não contém nenhum índice de Dirac ($\delta_{n,m}$) e então, ao aplicarmos uma rotação quiral, as exponenciais de ambos os lados não irão se cancelar, isto é, $e^{i\alpha\gamma_5}\delta_{n,m}e^{i\alpha\gamma_5} = \delta_{n,m}e^{2i\alpha\gamma_5} \neq \delta_{n,m}$. Assim, mesmo para férmions de massa nula a simetria quiral é quebrada explicitamente. Consequentemente não podemos analisar o efeito sutil da quebra espontânea da simetria quiral com férmions de Wilson.

Independentemente da maneira em que adicionamos outro termo para remover os dublês, não se pode implementar a simetria quiral na forma (4.39) e ao mesmo tempo ter uma teoria livre de dublês de férmions, este é um resultado do teorema de Nielsen e Ninomiya.[13–15]

Por muitos anos o teorema de Nielsen e Ninomiya parecia impor uma limitação ao desenvolvimento do estudo da QCD na rede, já que ele impede que possamos analisar a quebra espontânea da simetria quiral. Contudo, um conhecimento profundo da simetria quiral na rede se tornou possível apenas depois da redescoberta da equação de Ginsparg-Wilson.[16] Baseado em transformações de grupo de renormalização, Ginsparg e Wilson

propuseram a substituição da expressão (4.39) válida no contínuo por

$$D\gamma_5 + \gamma_5 D = aD\gamma_5 D\,. \tag{4.40}$$

Nesta equação o anticomutador (4.39) é combinado com um termo não nulo no lado direito. O operador de Dirac D tem dimensão do inverso do espaçamento da rede, portanto, um fator extra do espaçamento da rede aparece no termo quadrático em D. Assim, o termo extra da equação de Ginsparg e Wilson desaparece para $a \to 0$ e desta forma recuperamos a simetria quiral no limite do contínuo ingênuo. Contudo, a equação (4.40) também nos permite definir a simetria quiral para um espaçamento de rede a finito. Portanto, também podemos estudar os efeitos da quebra espontânea da simetria quiral usando a formulação de férmions de Wilson a partir da equação de Ginsparg e Wilson.

Desta forma terminamos esta seção. O estudo de um único férmion livre nos permitiu entender de maneira mais simples e direta como é realizada uma formulação de férmions na rede, desde como reescrever uma ação dada no espaço de Minkowski para o espaço euclidiano até como lidar com o problema de dublês de férmions que ocorre ao tentarmos implementar o limite do contínuo do propagador fermiônico.

Agora todos os resultados para férmions livres na rede poderão ser generalizados de maneira simples na próxima seção, em que lidaremos com a QCD na rede. Contudo, para estudar a QCD na rede, a parte fermiônica da teoria é apenas um dos ingredientes, assim, também precisaremos lidar com a parte de gauge da QCD (campos de glúons). De qualquer forma, é conveniente enfatizar que ao implementarmos os campos de glúons na rede, não ocorrerá nenhum tipo de problema como “dublês de bósons”, pois o limite do contínuo para as variáveis de gauge é bem definido. Portanto, a ação de glúons da QCD é mais simples de se lidar. De fato, o que causa severas restrições no estudo da QCD na rede são os problemas relacionados aos quarks.

5 QCD NA REDE

Nesta seção estudaremos inicialmente a ação da QCD no contínuo e suas simetrias. Em seguida, realizaremos a discretização ingênua da teoria. Usaremos a formulação de férmions de Wilson para eliminar os dublês de férmions. Para preservar a simetria de gauge presente na teoria do contínuo, será necessário introduzir os campos de ligação na rede. Diferentemente dos campos fermiônicos, que são colocados nos sítios da rede, os campos de ligação estão localizados na ligação (i.e. nos elos) entre sítios. Eles aparecem tanto na ação de glúons como na ação fermiônica da QCD. No final desta seção obteremos uma expressão para as funções de correlação da QCD.

O conteúdo deste capítulo é parcialmente baseado no Capítulo 2 do livro texto de C. Gattringer e C. Lang,[12] e constitui uma generalização de alguns resultados obtidos nos capítulos anteriores desta dissertação.

5.1 Quarks e Glúons

Os quarks são férmions massivos descritos por espinores de Dirac de quatro componentes ($\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma_4$)

$$\psi^{(f)}(x)_{\substack{\alpha \\ c}} \quad , \quad \bar{\psi}^{(f)}(x)_{\substack{\alpha \\ c}} \, . \tag{5.1}$$

Esses campos de quarks carregam muitos índices e argumentos. A posição do espaço-tempo é denotada por x, o índice de Dirac por $\alpha = 1, 2, 3, 4$, o índice de cor por $c = 1, 2, 3$. Geralmente usaremos letras gregas para índices de Dirac e letras latinas $a, b, c, \ldots$ para a cor. Além disso, o índice superior dos campos indica o sabor, i.e. up, down, strange, charm, bottom e top, com índices $f = 1, 2, \ldots, 6$, respectivamente, sendo $m^{(f)}$ as massas correspondentes. Deste modo, os índices de sabor deverão percorrer de 1 a N_f, o número de sabores. Para a teoria na rede normalmente é suficiente incluir apenas dois ou três dos sabores mais leves e usar a aproximação de massas degeneradas para os quarks up e down.

Os glúons são descritos pelo campo de gauge

$$A_\mu(x)_{cd} \, . \tag{5.2}$$

Assim como os campos de quarks, os campos de glúons tem um índice do espaço-tempo denotado por x. Contudo, eles constituem um campo vetorial, possuindo um índice de Lorentz μ que marca a direção das diferentes componentes do espaço-tempo. Além disso, eles também possuem índices de cor $c, d = 1, 2, 3$. (Note que, neste caso, os graus de liberdade de cor são oito, correspondendo aos geradores do grupo SU(3), já que os glúons estão na representação adjunta do grupo de gauge.) Para cada x e μ, o campo $A_\mu(x)$ é uma matriz 3×3 hermitiana e de traço nulo, pertencente à álgebra do grupo SU(3).

5.2 Parte Fermiônica da Ação da QCD

A parte fermiônica da ação da QCD deve envolver um termo similar ao de um férmion livre, mas deveremos acrescentar os índices de cor e sabor nos campos e realizar uma soma sobre todos esses índices. Além disso, também precisaremos adicionar um termo de interação que acopla os campos de quarks $\psi, \bar{\psi}$ com os campos de glúons $A_\mu(x)_{cd}$. Diferentemente dos férmions que vimos no Capítulo 4, na QCD os quarks interagem com os glúons.[17] De fato, a parte fermiônica da ação da QCD pode ser escrita como

$$\begin{aligned} S_F\left[\psi, \bar{\psi}, A\right] &= \sum_{f=1}^{N_f} \int d^4x\, \bar{\psi}^{(f)}(x)_{\substack{\alpha \\ c}} \Big\{ (\gamma_\mu)_{\alpha\beta} [\delta_{cd}\partial_\mu + iA_\mu(x)_{cd}] \\ &\qquad\qquad + m^{(f)} \delta_{\alpha\beta}\delta_{cd} \Big\} \psi^{(f)}(x)_{\substack{\beta \\ d}} \\ &= \sum_{f=1}^{N_f} \int d^4x\, \bar{\psi}^{(f)}(x) \Big\{ \gamma_\mu [\partial_\mu + iA_\mu(x)] + m^{(f)} \Big\} \psi^{(f)}(x)\,. \end{aligned} \tag{5.3}$$

Na primeira expressão escrevemos todos os índices explicitamente e existe uma soma implícita sobre índices repetidos. Na segunda expressão usamos uma notação mais compacta de matriz/vetor para os índices de cor e sabor. Esse resultado formal para a expressão da parte fermiônica da ação da QCD é inspirado na ação da eletrodinâmica, mais precisamente a ação da QCD é uma generalização da ação da eletrodinâmica.

5.2.1 Invariância de Gauge da Ação Fermiônica

Agora que introduzimos a ação fermiônica justificando brevemente o papel de cada termo na ação, será conveniente fazer um estudo um pouco mais detalhado de sua estrutura e simetrias associadas.

Apesar de não incluirmos a eletrodinâmica quântica (QED) em nosso trabalho nesta dissertação, é importante mencionar que a ação da QCD é obtida simplesmente generalizando-se a invariância de gauge da QED $[U(1) \to SU(3)]$. Assim, o estudo da estrutura e simetrias associadas da ação da QCD é inspirado por resultados conhecidos da QED.

Para a QCD é exigida a invariância sob rotações locais dos índices de cor dos quarks. Em cada ponto do espaço-tempo x escolhemos uma matriz independente 3×3 complexa $\Omega(x)$. A matriz deve ser unitária, $\Omega(x)^\dagger = \Omega(x)^{-1}$, e possuir $\det \Omega(x) = 1$. As matrizes que satisfazem essas propriedades são elementos do grupo não abeliano SU(3). As teorias de gauge que usam grupos não abelianos são frequentemente referidas como *teorias de Yang-Mills*.

Para que a ação da QCD possua simetria de gauge, devemos exigir que ela seja

invariante sob a transformação*

$$\psi(x) \to \psi'(x) = \Omega(x)\psi(x)\ , \quad \bar{\psi}(x) \to \bar{\psi}'(x) = \bar{\psi}(x)\Omega(x)^\dagger \tag{5.4}$$

para os campos fermiônicos e uma transformação $A_\mu(x) \to A'_\mu(x)$ para os campos de gauge, que ainda devemos determinar. A invariância da ação significa que

$$S_F[\psi', \bar{\psi}', A'] = S_F[\psi, \bar{\psi}, A]\,. \tag{5.5}$$

Aplicando a transformação de gauge (5.4) à parte fermiônica da ação da QCD (5.3), obtemos

$$S_F\left[\psi', \bar{\psi}', A'\right] = \int d^4x\, \bar{\psi}(x)\Omega(x)^\dagger \Big\{\gamma_\mu[\partial_\mu + iA'_\mu(x)] + m\Big\}\Omega(x)\psi(x)\,. \tag{5.6}$$

Usando $\Omega(x)^\dagger = \Omega(x)^{-1}$, vemos imediatamente que para o termo de massa as matrizes da transformação de gauge se cancelam. Para analisar os termos restantes primeiro notamos que a transformação do termo $\partial_\mu\psi(x)$ pode ser escrita como

$$\begin{aligned}
\partial_\mu\psi(x) &\to \partial_\mu[\Omega(x)\psi(x)] \\
&= \Omega(x)\partial_\mu\psi(x) + [\partial_\mu\Omega(x)]\psi(x) \\
&= \Omega(x)\{\partial_\mu\psi(x) + \Omega(x)^\dagger[\partial_\mu\Omega(x)]\psi(x)\}\,.
\end{aligned}$$

Assim, para os termos restantes serem invariantes por transformação de gauge (5.5) a seguinte relação deve ser satisfeita

$$\begin{aligned}
\partial_\mu + iA_\mu(x) &= \Omega(x)^\dagger[\partial_\mu + iA'_\mu(x)]\Omega(x) \\
&= \Omega(x)^\dagger\Omega(x)\{\partial_\mu + \Omega(x)^\dagger[\partial_\mu\Omega(x)]\} + +i\Omega(x)^\dagger A'_\mu(x)\Omega(x) \\
&= \partial_\mu + \Omega(x)^\dagger[\partial_\mu\Omega(x)] + i\Omega(x)^\dagger A'_\mu(x)\Omega(x)\,.
\end{aligned} \tag{5.7}$$

Comparando o lado esquerdo e direito dessa equação [e usando novamente $\Omega(x)^\dagger = \Omega(x)^{-1}$], podemos determinar a transformação adequada para o campo de gauge, a saber,

$$A_\mu(x) \to A'_\mu(x) = \Omega(x)A_\mu(x)\Omega(x)^\dagger + i[\partial_\mu\Omega(x)]\Omega(x)^\dagger\,. \tag{5.8}$$

Note que $A'_\mu(x)$ também é hermitiano e de traço nulo como exigido para campos de gauge. Para o primeiro termo no lado direito de (5.8) esse resultado segue do fato de que $A_\mu(x)$ tem traço nulo e $\Omega(x)^\dagger = \Omega(x)^{-1}$. Para o segundo termo o resultado é demonstrado no Apêndice C [veja a Equação (C.11)].

A exigência de invariância por transformação de gauge (5.4) para a parte fermiônica da ação da QCD (5.3) implica que os campos de gauge $A_\mu(x)$ devem se transformar como mostrado em (5.8).

* Por conveniência notacional iremos considerar apenas um sabor nessa discussão de transformação de gauge, assim, podemos eliminar o índice f devido ao sabor dos quarks na ação.

5.3 Parte Gluônica da Ação da QCD

A ação de glúons $S_G[A]$ é um funcional que depende apenas dos campos de gauge $A_\mu(x)$ e deve ser invariante sob a transformação (5.8), isto é,

$$S_G[A'] = S_G[A]\,. \tag{5.9}$$

Para construir uma ação com essa propriedade é conveniente definir a *derivada covariante*

$$D_\mu(x) = \partial_\mu + iA_\mu(x)\,. \tag{5.10}$$

A partir da primeira equação em (5.7), temos que a derivada covariante se transforma como

$$D_\mu(x) \to D'_\mu(x) = \partial_\mu + iA'_\mu(x) = \Omega(x)D_\mu(x)\Omega(x)^\dagger\,. \tag{5.11}$$

Essas propriedades garantem que $D_\mu(x)\psi(x)$ e $\psi(x)$ se transformam exatamente da mesma maneira, por isso o nome "derivada covariante".

Agora devemos usar a derivada covariante para construir a parte gluônica da ação da QCD. Essa parte gluônica é simplesmente uma generalização do termo da QED que fornece as equações de Maxwell no espaço livre, isto é, o termo associado às propriedades de ondas eletromagnéticas. Assim, definimos o tensor de força do campo de glúons $F_{\mu\nu}(x)$ como o comutador

$$F_{\mu\nu}(x) = -i\left[D_\mu(x), D_\nu(x)\right] = \partial_\mu A_\nu(x) - \partial_\nu A_\mu(x) + i\left[A_\mu(x), A_\nu(x)\right]\,, \tag{5.12}$$

onde o último termo no lado direito não se anula, uma vez que $A_\mu(x)$ e $A_\nu(x)$ são matrizes que não comutam entre si. Exceto por esse comutador, o tensor de força do campo $F_{\mu\nu}(x)$ tem a mesma forma que o tensor de força da eletrodinâmica (o comutador dos campos de gauge se anula na eletrodinâmica).

Como o tensor de força do campo é um comutador de duas derivadas covariantes, então ele herda as propriedades de transformação dessas derivadas (5.11), isto é,

$$F_{\mu\nu}(x) \to F'_{\mu\nu}(x) = \Omega(x)F_{\mu\nu}(x)\Omega(x)^\dagger\,. \tag{5.13}$$

Como um candidato para a ação de gauge podemos considerar

$$S_G[A] = \frac{1}{2g^2}\int d^4x\ \mathrm{tr}[F_{\mu\nu}(x)F_{\mu\nu}(x)]\,. \tag{5.14}$$

Naturalmente a ação é invariante sob a transformação de gauge. Basta notar que $\Omega(x)^\dagger = \Omega(x)^{-1}$ e usar a simples propriedade do traço de uma matriz $\mathrm{tr}(AB) = \mathrm{tr}(BA)$. Assim, as matrizes de transformação de gauge se cancelam quando aplicamos a transformação (5.13) à ação (5.14). Além disso, a soma sobre os índices de Lorentz μ, ν (convenção de soma) garante que a ação é um escalar de Lorentz.

Como já mencionado, a ação de glúons é uma generalização do termo de Maxwell no espaço livre da ação da eletrodinâmica. A menos de um fator global, elas são exatamente similares. Podemos nos livrar do traço na ação (5.14) para aumentar ainda mais a similaridade com a ação da eletrodinâmica. Mas antes, é conveniente mencionar que o fator $1/g^2$ em (5.14) é uma maneira adequada de introduzir o acoplamento. Após reescalar os campos de gauge

$$\frac{1}{g}A_\mu(x) \to A_\mu(x)\,, \tag{5.15}$$

o fator $1/g^2$ desaparece e a ação de gauge assume a forma mais familiar. Agora, a derivada covariante

$$D_\mu(x) \to \partial_\mu + igA_\mu(x) \tag{5.16}$$

torna evidente que o fator g é a força de acoplamento dos campos de gauge aos quarks. Contudo, na rede é mais conveniente ter o acoplamento de gauge como um fator global da ação de glúons, portanto, trabalharemos com a forma (5.14).

Agora para nos livrarmos do traço em (5.14) primeiro recordamos que os campos de gauge $A_\mu(x)$ são matrizes hermitianas e de traço nulo. Além disso, essas propriedades também são preservadas ao aplicar a transformação de gauge (5.8) sobre esses campos. Assim, os campos de gauge $A_\mu(x)$ estão na álgebra de Lie su(3), do grupo SU(3), e podemos escrevê-los como[†]

$$A_\mu(x) = \sum_{i=1}^{8} A^i_\mu(x)T_i\,. \tag{5.17}$$

As componentes $A^i_\mu(x), i = 1, 2, \ldots, 8$, são campos de valores reais, as assim chamadas componentes de cor, e os T_i's formam uma base para as matrizes 3×3 hermitianas e de traço nulo. Podemos usar a representação (5.17) dos campos de gauge para escrever o tensor de força do campo de glúons (5.12) em termos de suas componentes. Inserindo (5.17) em (5.12), obtemos

$$F_{\mu\nu}(x) = \sum_{i=1}^{8}\left[\partial_\mu A^{(i)}_\nu(x) - \partial_\nu A^{(i)}_\mu(x)\right]T_i + i\sum_{j,k=1}^{8} A^{(j)}_\mu(x)A^{(k)}_\nu(x)\,[T_j, T_k]\,. \tag{5.18}$$

O comutador no lado direito pode ser simplificado com o uso das relações (C.3) e obtemos

$$F_{\mu\nu}(x) = \sum_{i=1}^{8} F^{(i)}_{\mu\nu}(x)T_i\,, \tag{5.19a}$$

onde

$$F^{(i)}_{\mu\nu}(x) = \partial_\mu A^{(i)}_\nu(x) - \partial_\nu A^{(i)}_\mu(x) - f_{ijk}A^{(j)}_\mu(x)A^{(k)}_\nu(x)\,. \tag{5.19b}$$

† Veja o Apêndice C.

Essa representação do tensor de força pode ser inserida na ação de gauge (5.14), e usando (C.2) para calcular o traço, obtemos

$$S_G[A] = \frac{1}{4g^2} \sum_{i=1}^{8} \int d^4x \, F_{\mu\nu}^{(i)}(x) F_{\mu\nu}^{(i)}(x) \, . \tag{5.20}$$

A partir dessa equação podemos ver que a parte gluônica da ação da QCD é uma soma sobre as componentes de cor e cada termo tem a forma da ação de gauge da eletrodinâmica. Contudo, existe uma nova característica importante na ação de gauge da QCD: uma vez que a ação da QCD possui a simetria do grupo *não abeliano* SU(3), então isso dá origem em (5.19b) ao termo quadrático nos campos de gauge $A_\mu^{(i)}(x)$, que mistura as diferentes componentes de cor dos campos de glúons. Assim, na ação (5.20) encontramos não apenas os termos quadráticos nos campos de gauge, que são familiares da eletrodinâmica, mas também encontramos termos cúbicos e quárticos. Esses termos dão origem a interações entre os próprios glúons, tornando a QCD uma teoria altamente não trivial. As auto-interações são responsáveis pelo confinamento de cor, a característica mais proeminente da QCD.

5.4 Quarks na Rede

Foi visto na Seção 5.2.1 que a exigência da invariância da ação da QCD sob a transformação de gauge (5.4) dos índices de cor dos campos de quarks reforça a introdução de campos de gauge. Na rede é implementada a mesma transformação, escolhendo-se um elemento $\Omega(n)$ de SU(3) para cada sítio n da rede e transformando-se os campos fermiônicos de acordo com[‡]

$$\psi(n) \to \psi'(n) = \Omega(n)\psi(n) \quad , \quad \bar{\psi}(n) \to \bar{\psi}'(n) = \bar{\psi}(n)\Omega(n)^\dagger \, . \tag{5.21}$$

Para realizar a formulação de quarks na rede será conveniente dividir a ação fermiônica da QCD no contínuo em duas partes, uma parte associada a férmions livres e a outra as interações, isto é,

$$S_F[\psi, \bar{\psi}, A] = S_F^0[\psi, \bar{\psi}] + S_F^{\text{int}}[\psi, \bar{\psi}, A] \, , \tag{5.22a}$$

onde

$$S_F^0[\psi, \bar{\psi}] = \int d^4x \, \bar{\psi}(x)(\gamma_\mu \partial_\mu + m)\psi(x) \tag{5.22b}$$

e

$$S_F^{\text{int}}[\psi, \bar{\psi}, A] = \int d^4x \, \bar{\psi}(x)[i\gamma_\mu A_\mu(x)]\psi(x) \, . \tag{5.22c}$$

Agora é necessário discretizar a ação fermiônica da QCD. Para isso, primeiro será discretizada a parte associada a férmions livres.

‡ Consideraremos apenas um sabor nessa seção, por conveniência notacional.

5.4.1 Introdução de Campos de Gauge como Variáveis de Ligação

A ação na rede de (5.22b) é simplesmente a ação de um férmion livre (4.6), isto é,

$$S_F^0\left[\psi,\bar{\psi}\right] = a^4 \sum_{n\in\Lambda} \bar{\psi}(n)\left[\sum_{\mu=1}^{4}\gamma_\mu \frac{\psi(n+\hat{\mu})-\psi(n-\hat{\mu})}{2a} + m\psi(n)\right]. \tag{5.23}$$

Na rede encontramos que o termo de massa de (5.23) é invariante sob a transformação (5.21). Contudo, os termos da derivada discretizada não são invariantes por (5.21). Consideramos, por exemplo, o termo

$$\bar{\psi}(n)\psi(n+\hat{\mu}) \to \bar{\psi}'(n)\psi'(n+\hat{\mu}) = \bar{\psi}(n)\Omega(n)^\dagger\Omega(n+\hat{\mu})\psi(n+\hat{\mu})\,. \tag{5.24}$$

Este termo não é invariante por transformação de gauge. Se, contudo, introduzirmos um campo $U_\mu(n)$ com um índice direcional μ, então

$$\bar{\psi}'(n)U'_\mu(n)\psi'(n+\hat{\mu}) = \bar{\psi}(n)\Omega(n)^\dagger U'_\mu(n)\Omega(n+\hat{\mu})\psi(n+\hat{\mu}) \tag{5.25}$$

é invariante de gauge se definirmos a transformação do novo campo por

$$U_\mu(n) \to U'_\mu(n) = \Omega(n)U_\mu(n)\Omega(n+\hat{\mu})^\dagger\,. \tag{5.26}$$

Para garantir a invariância de gauge da QCD na rede temos que introduzir os campos de gauge $U_\mu(n)$ como elementos do grupo SU(3) que se transformam de acordo com (5.26). Essas variáveis matriciais possuem orientação e são anexadas às ligações da rede, sendo, assim, chamadas de *variáveis de ligação*. $U_\mu(n)$ reside na ligação (ou elo) que conecta os sítios n e $n+\hat{\mu}$.

Já que as variáveis de ligação são orientadas, também podemos definir variáveis de ligação que apontam na direção μ negativa. Contudo, elas não são variáveis independentes, mas são introduzidas apenas por conveniência notacional. Em particular, $U_{-\mu}(n)$ aponta de n para $n-\hat{\mu}$ e está relacionada à variável de ligação $U_\mu(n-\hat{\mu})$ orientada positivamente pela definição

$$U_{-\mu}(n) \equiv U_\mu(n-\hat{\mu})^\dagger\,. \tag{5.27}$$

A Figura 3 ilustra a configuração geométrica das variáveis de ligação na rede. A partir da definição (5.27) e da Equação (5.26) podemos obter a transformação da variável de ligação na direção negativa, isto é,

$$U_{-\mu}(n) \to U'_{-\mu}(n) = \Omega(n)U_{-\mu}(n)\Omega(n-\hat{\mu})^\dagger\,. \tag{5.28}$$

Na rede é necessário introduzir os campos de glúons como elementos do grupo SU(3), não como os elementos da álgebra de Lie que foram usados no contínuo. De acordo com as transformações de gauge (5.26) e (5.28), as variáveis de ligação transformadas também

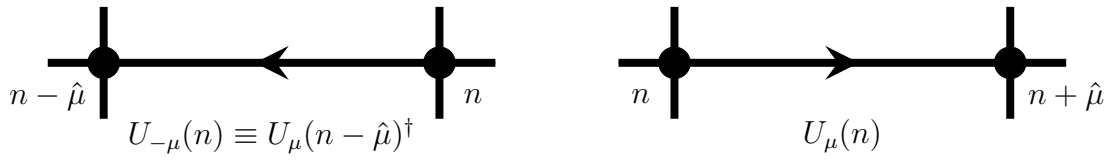

Figura 3 – As variáveis de ligação $U_\mu(n)$ e $U_{-\mu}(n)$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

são elementos do grupo SU(3). Agora que introduzimos as variáveis de ligação e suas propriedades sob transformações de gauge, podemos generalizar a ação de um férmion livre (5.23) para a assim chamada *ação fermiônica ingênua* para férmions em um campo de gauge externo U

$$S_F\left[\psi,\bar{\psi},U\right] = a^4 \sum_{n\in\Lambda} \bar{\psi}(n) \left[\sum_{\mu=1}^{4} \gamma_\mu \frac{U_\mu(n)\psi(n+\hat{\mu}) - U_{-\mu}(n)\psi(n-\hat{\mu})}{2a} + m\psi(n)\right] . \tag{5.29}$$

Usando (5.21), (5.26) e (5.28) para as propriedades de transformações de férmions e variáveis de ligação, podemos ver facilmente a invariância de gauge da parte associada a férmions livres (5.22b) da ação fermiônica da QCD (5.22a), isto é, $S_F^0[\psi,\bar{\psi},U] = S_F^0[\psi',\bar{\psi}',U']$.

Até agora discretizamos a parte de férmions livres da ação da QCD e introduzimos as variáveis de ligação para garantir a simetria de gauge da ação na rede. Contudo, a ação obtida (5.29) já é a ação da parte fermiônica da QCD na rede, isto é, ela também contém a parte de interações discretizada (5.22c). De fato, se expandirmos a versão na rede de (5.29) para $a \to 0$, conseguimos recuperar a parte fermiônica da QCD (5.22a).

Agora para conseguirmos ver que a ação fermiônica ingênua (5.29) descreve a parte fermiônica da QCD na rede, precisamos mostrar a relação entre as variáveis de ligação e o campo de gauge A_μ na rede.

5.4.2 Relação entre Variáveis de Ligação e Campos de Gauge

As variáveis de ligação $U_\mu(n)$ conectam os pontos n e $n+\hat{\mu}$ e possuem a propriedade de transformação dada por (5.26), que depende de duas matrizes de transformação $\Omega(n)$ e $\Omega(n+\hat{\mu})^\dagger$. No contínuo também existe um objeto com as mesmas propriedades de transformação, o assim chamado *transportador de gauge*

$$G(x,y) = P\exp\left(i\int_{C_{xy}} A\cdot ds\right) , \tag{5.30}$$

onde P denota o ordenamento de caminho. O transportador de gauge é a integral exponencial de caminho ordenado do campo de gauge A_μ ao longo de alguma curva C_{xy} conectando dois pontos x e y. Sob uma transformação de gauge (5.8) ele se transforma

como

$$G(x,y) \to \Omega(x)G(x,y)\Omega(y)^\dagger \,. \tag{5.31}$$

Note que os transportadores possuem as mesmas propriedades de transformação das variáveis de ligação $U_\mu(n)$ quando n e $n+\hat{\mu}$ são considerados como os pontos das extremidades de um caminho. Baseado nessas propriedades de transformação, as variáveis de ligação $U_\mu(n)$ são interpretadas como uma versão na rede do transportador de gauge conectando os pontos n e $n+\hat{\mu}$, a saber, $U_\mu(n) = G(n, n+\hat{\mu}) + \mathcal{O}(a)$. Assim, podemos introduzir os campos de gauge na rede $A_\mu(n)$ e escrevemos

$$U_\mu(n) = \exp[iaA_\mu(n)] \,. \tag{5.32}$$

Comparando (5.30) e (5.32), vemos que aproximamos a integral ao longo do caminho de n até $n+\hat{\mu}$ por $aA_\mu(n)$, isto é, pelo comprimento a do caminho vezes o valor do campo $A_\mu(n)$ no ponto de partida. Essa é uma boa aproximação para $\mathcal{O}(a)$ e nenhuma ordenação de caminho é necessária para essa ordem.

Como estamos interessados em mostrar que (5.29) descreve a parte fermiônica da ação da QCD na rede, isto é, tem como limite $a \to 0$ a parte fermiônica da ação da QCD (5.22a), então é conveniente expandirmos (5.32) para a pequeno,

$$U_\mu(n) = \mathbb{1} + iaA_\mu(n) + \mathcal{O}(a^2) \quad , \quad U_{-\mu}(n) = \mathbb{1} - iaA_\mu(n-\hat{\mu}) + \mathcal{O}(a^2) \,, \tag{5.33}$$

onde usamos (5.27) e $A_\mu = A_\mu^\dagger$ para a expansão de $U_{-\mu}(n)$. Inserindo essas variáveis de ligação expandidas em (5.29), obtemos

$$\begin{aligned} S_F^0\left[\psi,\bar{\psi}\right] &= a^4 \sum_{n\in\Lambda} \bar{\psi}(n) \left[\sum_{\mu=1}^{4} \gamma_\mu \frac{\psi(n+\hat{\mu}) - \psi(n-\hat{\mu})}{2a} + m\psi(n)\right] \\ &\quad + ia^4 \sum_{n\in\Lambda}\sum_{\mu=1}^{4} \bar{\psi}(n)\gamma_\mu \frac{1}{2}\Big[A_\mu(n)\psi(n+\hat{\mu}) + A_\mu(n-\hat{\mu})\psi(n-\hat{\mu})\Big] \\ &= a^4 \sum_{n\in\Lambda} \bar{\psi}(n) \left[\sum_{\mu=1}^{4} \gamma_\mu \frac{\psi(n+\hat{\mu}) - \psi(n-\hat{\mu})}{2a} + m\psi(n)\right] \\ &\quad + ia^4 \sum_{n\in\Lambda}\sum_{\mu=1}^{4} \bar{\psi}(n)\gamma_\mu A_\mu(n)\psi(n) + \mathcal{O}(a) \,. \end{aligned} \tag{5.34}$$

Naturalmente o primeiro termo é a discretização da parte de férmions livres da ação da QCD (5.22b) antes de introduzirmos as variáveis de ligação para a deixar invariante por transformação de gauge. O segundo termo com um erro da ordem do espaçamento da rede é a própria parte de interações (5.22c) discretizada. Assim, no limite em que o espaçamento da rede se anula $a \to 0$, a ação (5.29) recupera a parte fermiônica da ação da QCD (5.22a).

Apesar de a ação fermiônica ingênua ter como limite $a \to 0$ a parte fermiônica da ação da QCD na rede, ainda sim ela não é a ação final para os quarks na rede, pois devemos nos lembrar da Seção 4.2, i.e. ainda precisamos modificar a ação de férmions ingênua para resolver o problema de dublês de férmions, que sempre aparecem nas teorias de férmions na rede. Assim, a seguir resolveremos o problema de dublês de férmions da QCD na rede usando a formulação de férmions de Wilson vista na Seção 4.3.

5.4.3 Férmions de Wilson em QCD na Rede

Vimos anteriormente que para discretizar a ação fermiônica da QCD (5.22a) basta discretizar a parte de férmions livres da QCD (5.22b) e impor invariância da ação na rede sob transformações de gauge (5.21). Essa invariância foi alcançada com a introdução das variáveis de ligação U_μ que se transformam por (5.26). Assim, para escrever a ação fermiônica da QCD na rede com o termo de Wilson precisamos apenas impor invariância por transformações de gauge da ação de férmions livres com o termo de Wilson (4.28). Isto é realizado simplesmente usando as variáveis de ligação para conectar sítios vizinhos da rede. Em outras palavras, precisamos fazer apenas as substituições

$$\delta_{n\pm\hat{\mu},m} \to U_{\pm\mu}(n)\delta_{n\pm\hat{\mu},m}$$

em (4.28). Portanto, a ação fermiônica para a QCD na rede com apenas um sabor é dada por

$$S_F^{(\mathrm{W})}\left[\psi,\bar{\psi},U\right] = a^4 \sum_{n,m\in\Lambda}\sum_{\alpha,\beta} \bar{\psi}(n)_\alpha D(n|m)_{\alpha\beta}\psi(m)_\beta\,, \tag{5.35}$$

onde o operador de Dirac completo de Wilson da QCD é dado por

$$D(n|m)_{\alpha\beta} = \left(m+\frac{4}{a}\right)\delta_{\alpha\beta}\delta_{n,m} - \frac{1}{2a}\sum_{\mu=\pm1}^{\pm4}(1-\gamma_\mu)_{\alpha\beta}U_\mu(n)\delta_{n+\hat{\mu},m}\,, \tag{5.36}$$

lembrando que definimos

$$\gamma_{-\mu} = -\gamma_\mu \quad , \quad \mu = 1,2,3,4\,. \tag{5.37}$$

Agora é conveniente generalizar esse resultado para o caso da QCD com N_f sabores. Para isso basta adicionar um índice f à massa m do quark que aparece na ação e realizar uma soma sobre todos os sabores. Deixando os índices de cor explícitos, a ação fermiônica para a QCD na rede com N_f sabores é dada por

$$S_F^{(\mathrm{W})}\left[\psi,\bar{\psi},U\right] = a^4 \sum_{f=1}^{N_f}\sum_{n,m\in\Lambda}\sum_{\substack{\alpha,\beta\\ a,b}} \bar{\psi}^{(f)}(n)_{\underset{a}{\alpha}} D^{(\mathrm{f})}(n|m)_{\underset{ab}{\alpha\beta}}\psi^{(f)}(m)_{\underset{b}{\beta}}\,, \tag{5.38}$$

onde o operador de Dirac completo de Wilson da QCD é dado por

$$D^{(\mathrm{f})}(n|m)_{\underset{ab}{\alpha\beta}} = \left(m^{(f)}+\frac{4}{a}\right)\delta_{\alpha\beta}\delta_{ab}\delta_{n,m} - \frac{1}{2a}\sum_{\mu=\pm1}^{\pm4}(1-\gamma_\mu)_{\alpha\beta}U_\mu(n)_{ab}\delta_{n+\hat{\mu},m}\,. \tag{5.39}$$

5.5 Glúons na Rede

Agora construiremos a ação de gauge na rede, mais precisamente, a assim chamada *ação de gauge de Wilson*. Para isso usaremos as variáveis de ligação U_μ, que são as grandezas básicas para representar os glúons na rede. Naturalmente a ação de gauge na rede no limite $a \to 0$ deve recuperar a ação de glúons (5.20).

5.5.1 Objetos Invariantes por Transformações de Gauge

Para construir a ação de gauge na rede, primeiro é conveniente estudarmos certos objetos construídos com variáveis de ligação que são invariantes por transformações de gauge. Assim, seja $\mathcal{P}$ um caminho de k ligações na rede conectando os pontos n_0 e n_1. Definimos o produto ordenado

$$P[U] = U_{\mu_0}(n_0)U_{\mu_1}(n_0+\hat{\mu}_0)\dots U_{\mu_{k-1}}(n_1-\hat{\mu}_{k-1}) \equiv \prod_{(n,\mu)\in\mathcal{P}} U_\mu(n)\,. \tag{5.40}$$

Este objeto é a versão na rede do transportador de gauge do contínuo (5.30). O caminho $\mathcal{P}$ pode conter variáveis de ligação em qualquer direção μ. A partir das propriedades de transformação (5.26) e (5.28) das variáveis de ligação, segue que todas as rotações de gauge se cancelam, exceto nos pontos extremos de um determinado caminho $\mathcal{P}$. Deste modo, o produto ordenado $P[U]$ se transforma como

$$P[U] \to P[U'] = \Omega(n_0)P[U]\Omega(n_1)^\dagger\,. \tag{5.41}$$

Uma maneira de construir uma grandeza invariante por transformação de gauge usando um produto de variáveis de ligação $P[U]$ é escolher um caminho fechado $\mathcal{L}$ para $\mathcal{P}$ e tomar o traço do produto ordenado, isto é,

$$L[U] = \mathrm{tr}\left[\prod_{(n,\mu)\in\mathcal{L}} U_\mu(n)\right]\,. \tag{5.42}$$

De acordo com (5.41), as únicas matrizes de transformação de gauge que permanecem ao realizarmos uma transformação de gauge do produto ordenado são $\Omega(n_0)$ e $\Omega(n_1)^\dagger$. Quando escolhemos um caminho fechado para $\mathcal{P}$, então $n_0 = n_1$. Assim, ao tomarmos o traço do produto ordenado, as matrizes de transformação de gauge desaparecem, isto é,

$$L[U] \to L[U'] = \mathrm{tr}\left[\prod_{(n,\mu)\in\mathcal{L}} \Omega(n_0)U_\mu(n)\Omega(n_0)^\dagger\right] = \mathrm{tr}\left[\prod_{(n,\mu)\in\mathcal{L}} U_\mu(n)\right] = L[U]\,. \tag{5.43}$$

O traço sobre um caminho fechado do produto de variáveis de ligação é um objeto invariante por transformação de gauge.

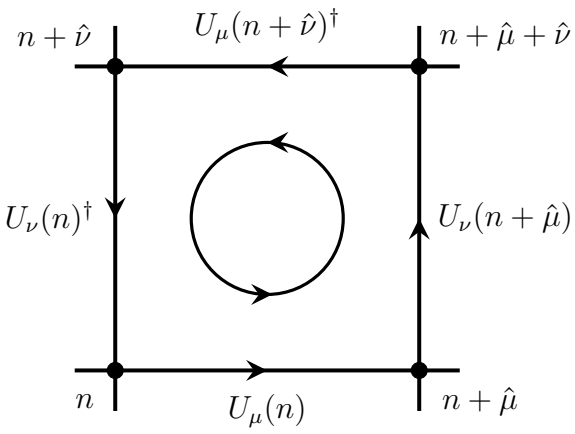

Figura 4 – As quatro variáveis de ligação que formam a plaqueta $U_{\mu\nu}(n)$. O círculo indica o ordenamento das variáveis de ligação na plaqueta.

Fonte: Elaborada pelo autor.

5.5.2 Ação de Glúons na Rede

Para construir a ação de glúons na rede é suficiente usar o caminho fechado $\mathcal{L}$ não trivial mais curto possível sobre a rede em (5.42), o caminho chamado *plaqueta*. A variável de plaqueta $U_{\mu\nu}(n)$ é um produto de apenas quatro variáveis de ligação definidas por

$$\begin{aligned} U_{\mu\nu}(n) &= U_\mu(n)U_\nu(n+\hat{\mu})U_{-\mu}(n+\hat{\mu}+\hat{\nu})U_{-\nu}(n+\hat{\nu}) \\ &= U_\mu(n)U_\nu(n+\hat{\mu})U_\mu(n+\hat{\nu})^\dagger U_\nu(n)^\dagger \,. \end{aligned} \tag{5.44}$$

Na segunda linha foi usada a definição (5.27) para as variáveis de ligação em uma direção negativa. A Figura 4 ilustra a variável de plaqueta $U_{\mu\nu}(n)$. De acordo com (5.43), o traço da variável de plaqueta é invariante por transformação de gauge, isto é,

$$\mathrm{tr}\left[U_{\mu\nu}(n)\right] \to \mathrm{tr}\left[U'_{\mu\nu}(n)\right] = \mathrm{tr}\left[U_{\mu\nu}(n)\right] \,. \tag{5.45}$$

Agora mostraremos a forma de Wilson para a ação de gauge na rede, que foi a primeira formulação de teoria de gauge na rede.[2] A *ação de gauge de Wilson* é uma soma sobre todas as plaquetas, com cada plaqueta sendo contada com apenas uma orientação. A soma pode ser realizada sobre todos os pontos n onde as plaquetas estão localizadas, combinada com a soma sobre os índices de Lorentz $1 \leq \mu < \nu \leq 4$,

$$S_G[U] = \frac{2}{g^2}\sum_{n\in\Lambda}\sum_{\mu<\nu}\mathrm{Re}\ \mathrm{tr}[\mathbb{1} - U_{\mu\nu}(n)] \,. \tag{5.46}$$

Cada contribuição individual é a parte real do traço de uma matriz unitária menos uma variável de plaqueta. O fator $2/g^2$ é incluído para combinar com a forma da ação no contínuo (5.14) no limite $a \to 0$.

Agora devemos mostrar que a ação de gauge de Wilson (5.46) no limite $a \to 0$ resulta na ação de glúons no contínuo (5.14). Para lidar com o produto de quatro variáveis

de ligação na variável de plaqueta, é conveniente usarmos a fórmula de Campbell-Hausdorff, isto é,

$$\exp(A)\exp(B) = \exp\left(A + B + \frac{1}{2}[A,B] + \cdots\right) .$$

Substituindo a variável de ligação (5.32) na definição da variável de plaqueta (5.44) e usando a formula de Campbell-Hausdorff, obtemos

$$\begin{aligned}
U_{\mu\nu}(n) &= U_\mu(n)U_\nu(n+\hat{\mu})U_\mu(n+\hat{\nu})^\dagger U_\nu(n)^\dagger \\
&= \exp[iaA_\mu(n)]\exp[iaA_\nu(n+\hat{\mu})]\exp[-iaA_\mu(n+\hat{\nu})]\exp[-iaA_\nu(n)] \\
&= \exp\left[iaA_\mu(n) + iaA_\nu(n+\hat{\mu}) - \frac{a^2}{2}[A_\mu(n), A_\nu(n+\hat{\mu})] + \mathcal{O}(a^3)\right] \\
&\quad \exp\left[-iaA_\mu(n+\hat{\nu}) - iaA_\nu(n) - \frac{a^2}{2}[A_\mu(n+\hat{\nu}), A_\nu(n)] + \mathcal{O}(a^3)\right] \\
&= \exp\left[iaA_\mu(n) + iaA_\nu(n+\hat{\mu}) - \frac{a^2}{2}[A_\mu(n), A_\nu(n+\hat{\mu})]\right. \\
&\quad -iaA_\mu(n+\hat{\nu}) - iaA_\nu(n) - \frac{a^2}{2}[A_\mu(n+\hat{\nu}), A_\nu(n)] \\
&\quad \left. +\frac{1}{2}[iaA_\mu(n) + iaA_\nu(n+\hat{\mu}), -iaA_\mu(n+\hat{\nu}) - iaA_\nu(n)] + \mathcal{O}(a^3)\right] \\
&= \exp\left[iaA_\mu(n) + iaA_\nu(n+\hat{\mu}) - \frac{a^2}{2}[A_\mu(n), A_\nu(n+\hat{\mu})] + \right. \\
&\quad -iaA_\mu(n+\hat{\nu}) - iaA_\nu(n) - \frac{a^2}{2}[A_\mu(n+\hat{\nu}), A_\nu(n)] \\
&\quad +\frac{a^2}{2}[A_\mu(n), A_\mu(n+\hat{\nu})] + \frac{a^2}{2}[A_\mu(n), A_\nu(n)] \\
&\quad \left. +\frac{a^2}{2}[A_\nu(n+\hat{\mu}), A_\mu(n+\hat{\nu})] + \frac{a^2}{2}[A_\nu(n+\hat{\mu}), A_\nu(n)] + \mathcal{O}(a^3)\right] .
\end{aligned} \tag{5.47}$$

Esta expressão contém campos de gauge com argumentos deslocados, assim, devemos realizar uma expansão em Taylor para esses campos, isto é,

$$A_\alpha(n+\hat{\beta}) = A_\alpha(n) + a\partial_\beta A_\alpha(n) + \mathcal{O}(a^2) \qquad (\alpha, \beta = \mu, \nu) . \tag{5.48}$$

Com esta expansão muitos termos se cancelam e a variável de plaqueta pode ser escrita como

$$\begin{aligned}
U_{\mu\nu}(n) &= \exp\left\{ia^2\left[\,\partial_\mu A_\nu(n) - \partial_\nu A_\mu(n) + i\,[A_\mu(n), A_\nu(n)]\,\right] + \mathcal{O}(a^3)\right\} \\
&= \exp\left[ia^2 F_{\mu\nu}(n) + \mathcal{O}(a^3)\right] .
\end{aligned} \tag{5.49}$$

No segundo passo foi usada a definição do tensor de força no contínuo (5.12). Agora podemos inserir a variável de plaqueta expandida (5.49) na ação de gauge de Wilson (5.46),

isto é,

$$
\begin{aligned}
S_G[U] &= \frac{2}{g^2}\sum_{n\in\Lambda}\sum_{\mu<\nu}\mathrm{Re\ tr}\left\{\mathbb{1}-\exp\left[ia^2F_{\mu\nu}(n)+\mathcal{O}(a^3)\right]\right\} \\
&= \frac{2}{g^2}\sum_{n\in\Lambda}\sum_{\mu<\nu}\left(\mathrm{Re\ tr}\left[-ia^2F_{\mu\nu}(n)\right]-\mathrm{Re\ tr}\left\{\frac{1}{2}\left[-ia^2F_{\mu\nu}(n)\right]^2\right\}\right)+\mathcal{O}(a^2) \\
&= \frac{a^4}{2g^2}\sum_{n\in\Lambda}\sum_{\mu,\nu}\mathrm{tr}\left[F_{\mu\nu}(n)^2\right]+\mathcal{O}(a^2)\,. \qquad (5.50)
\end{aligned}
$$

No segundo passo foi expandida a exponencial em Taylor. Note que o primeiro termo na segunda linha envolve a parte real de um traço de argumento imaginário, logo ele se anula. De maneira análoga, os termos em $\mathcal{O}(a^3)$ na expansão (5.49) também se cancelam. Deste modo, foi necessário expandir a exponencial da primeira linha até segunda ordem. Na terceira linha aparece um fator 1/2 adicional devido à mudança na soma $\sum_{\mu<\nu}=(1/2)\sum_{\mu,\nu}$. Agora se considerarmos o próximo termo da exponencial, aparecerá um terceiro termo na segunda linha que se cancela da forma

$$
a^4\sum_{n\in\Lambda}a^2\overset{a\to 0}{\longrightarrow}\int d^4x\ a^2=\mathcal{O}(a^2)\,.
$$

Portanto, apesar de ele ser proporcional à potencia 6 do espaçamento de rede a, esse termo se aproxima do contínuo por $\mathcal{O}(a^2)$, como afirmado em (5.50). Assim, agora é fácil notar que a ação de gauge de Wilson (5.46) se aproxima da ação de gauge no contínuo (5.14), isto é,

$$
\lim_{a\to 0}S_G[U]=S_G[A]\,. \qquad (5.51)
$$

5.6 Funções de Correlação para a QCD

As funções de correlação para a QCD são uma extensão das funções de correlação bosônicas e fermiônicas. Agora elas podem envolver tanto campos bosônicos como campos fermiônicos. O peso de Boltzmann que aparece na integral de trajetória é devido à ação da QCD, ação de gauge mais a ação fermiônica, e a medida de integração é o produto de todas as variáveis de ligação e campos de quarks. Deste modo, uma função de correlação arbitrária para a QCD

$$
\langle\psi^{(f_1)}(n_1)_{\substack{\alpha_1\\c_1}}\ldots\bar{\psi}^{(g_1)}(m_1)_{\substack{\beta_1\\d_1}}\ldots U_{\mu_1}(k_1)_{a_1b_1}\ldots\rangle \qquad (5.52a)
$$

é dada por

$$
\frac{1}{Z}\int D(\bar{\psi}\psi)D(U)\left[\psi^{(f_1)}(n_1)_{\substack{\alpha_1\\c_1}}\ldots\bar{\psi}^{(g_1)}(m_1)_{\substack{\beta_1\\d_1}}\ldots U_{\mu_1}(k_1)_{a_1b_1}\ldots\right]e^{-S_{\mathrm{QCD}}[\psi,\bar{\psi},U]}\,, \qquad (5.52b)
$$

onde

$$
Z=\int D(\bar{\psi}\psi)D(U)e^{-S_{QCD}[\psi,\bar{\psi},U]}\,. \qquad (5.52c)
$$

A medida de integração é escrita como

$$D(\bar{\psi}\psi) = \prod_{n\in\Lambda}\prod_{f,\alpha,c} d\bar{\psi}^{(f)}(n)_{\underset{c}{\alpha}} d\psi^{(f)}(n)_{\underset{c}{\alpha}} \quad , \quad D(U) = \prod_{n\in\Lambda}\prod_{\mu=1}^{4}\prod_{a,b} dU_\mu(n)_{ab}\,. \tag{5.52d}$$

A ação da QCD na rede na formulação de Wilson é dada por

$$S_{QCD}[\psi,\bar{\psi},U] = S_F^{(W)}[\psi,\bar{\psi},U] + S_G[U]\,, \tag{5.53a}$$

onde a ação fermiônica é dada por

$$S_F^{(\mathrm{W})}\left[\psi,\bar{\psi},U\right] = a^4 \sum_{f=1}^{N_f}\sum_{n,m\in\Lambda}\sum_{\substack{\alpha,\beta\\ a,b}} \bar{\psi}^{(f)}(n)_{\underset{a}{\alpha}} D^{(\mathrm{f})}(n|m)_{\underset{ab}{\alpha\beta}} \psi^{(f)}(m)_{\underset{b}{\beta}}\,. \tag{5.53b}$$

O operador de Dirac completo de Wilson da QCD é dado por

$$D^{(\mathrm{f})}(n|m)_{\underset{ab}{\alpha\beta}} = \left(m^{(f)} + \frac{4}{a}\right)\delta_{\alpha\beta}\delta_{ab}\delta_{n,m} - \frac{1}{2a}\sum_{\mu=\pm1}^{\pm4}(1-\gamma_\mu)_{\alpha\beta}U_\mu(n)_{ab}\delta_{n+\hat{\mu},m}\,. \tag{5.53c}$$

A ação de glúons é dada por

$$S_G[U] = \frac{\beta}{3}\sum_{n\in\Lambda}\sum_{\mu<\nu}\mathrm{Re}\,\mathrm{tr}[\mathbb{1} - U_{\mu\nu}(n)]\,. \tag{5.53d}$$

Na equação (5.53d) foi usada uma notação amplamente utilizada

$$\beta = \frac{6}{g^2}\,, \tag{5.54}$$

onde β é o então denominado *acoplamento inverso*. Mais precisamente, essa é a definição de β para o caso SU(3), com o qual estamos lidando na QCD.

Note que no caso da QCD na rede o cálculo de uma função de correlação envolve uma medida de integração sobre os campos fermiônicos e uma medida de integração sobre as variáveis de ligação. Para realizar a integração sobre os campos fermiônicos basta aplicar os resultados obtidos da álgebra de Grassmann na Seção 3.2.2.2, ou seja, temos uma soma de produtos de contrações. Contudo, as integrações que sobram para as variáveis de ligação em geral não possuem soluções analíticas. Deste modo, precisaremos aprender as técnicas computacionais que podem ser empregadas para lidar com essa parte do cálculo de funções de correlação.

6 SIMULAÇÃO NUMÉRICA

Em 1974, Wilson publicou um artigo sobre confinamento de quarks.[2] Naquele trabalho foi introduzida a formulação de rede da QCD. A partir de uma expansão para o acoplamento forte [$\beta \gtrsim 0$ em (5.54)], Wilson conseguiu aproximar a média dos campos de gauge e mostrar que seu comportamento explica o confinamento de quarks. Contudo, o limite do contínuo é obtido quando $\beta \to \infty$, isto é, na condição de acoplamento fraco. Apenas em 1979 com o uso de simulações numéricas foi possível realizar pela primeira vez cálculos da média dos campos de gauge, através do método de Monte Carlo, considerando o limite do contínuo e, assim, obter resultados que apoiam a coexistência de confinamento de quarks e liberdade assintótica.[4]

Após esse desenvolvimento inicial da teoria de rede da QCD, os físicos de partículas ficaram muito otimistas, pois através da solução numérica da integral de trajetória na rede (5.52) seria possível determinar as propriedades do regime não-perturbativo da QCD. Contudo, esse entusiasmo inicial se dissipou rapidamente, uma vez que se percebeu que computadores muito grandes deveriam ser utilizados para integrar numericamente as integrais de trajetória pertinentes.[18] No entanto, dois desenvolvimentos recentes tornaram as simulações de QCD mais acessíveis. Primeiro, os computadores pequenos (notebook) se tornaram muito mais rápidos – de 10^3 até 10^6 vezes. Assim, no que se refere às simulações mais simples, elas podem ser feitas usando um notebook pessoal.

Houve ainda outro desenvolvimento que tornou as simulações mais acessíveis. Para compreendê-lo é preciso saber que o custo de um cálculo da QCD completa na rede é dado aproximadamente pela fórmula

$$\text{cost} \approx \left(\frac{L}{a}\right)^4 \frac{1}{a} \frac{1}{m_\pi^2 a}\,, \tag{6.1}$$

onde o primeiro fator é o número de sítios da rede, enquanto o segundo e terceiro fatores são devidos à "desaceleração crítica" dos algoritmos usados para a simulação. A partir dessa fórmula, notamos que o custo computacional é proporcional a $1/a^6$. Portanto, é conveniente manter a tão grande quanto possível. Até um pouco antes do ano 2000, acreditava-se que $a < 0.05 - 0.1$ fm seria essencial para simulações de QCD de grande precisão. Contudo, $a \approx 0.3 - 0.4$ fm funciona bastante bem. Dado que o custo varia com $1/a^6$, as redes mais grosseiras deveriam ser de 10^3 até 10^6 vezes mais baratas para simular.

Agora que já sabemos um pouco sobre o custo computacional em QCD na rede, será conveniente descrever certos métodos computacionais que são empregados em cálculos de observáveis físicos. A determinação do espectro de hádrons será a principal aplicação deste trabalho. Contudo, as simulações envolvendo funções de correlação fermiônicas são consideravelmente complicadas e pesadas computacionalmente. Assim, será mais

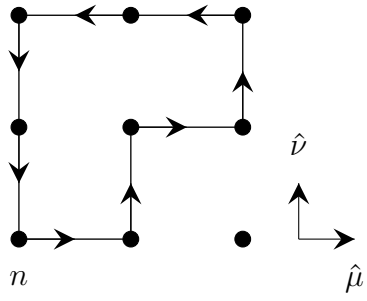

Figura 5 – Um caminho C para o loop de Wilson.

Fonte: Elaborada pelo autor.

conveniente inicialmente estudarmos simulações de QCD envolvendo apenas a teoria de gauge pura, isto é, calcular observáveis físicos que dependam apenas de variáveis de gauge.

Apesar de parecer que isso possa nos distanciar do objetivo principal do trabalho, que é o estudo de quarks na rede, na realidade isso não ocorre. De fato, qualquer simulação em QCD pode ser dividida em duas partes. A primeira parte é construir configurações de gauge que satisfaçam o peso, dado pela ação da QCD. No caso de uma teoria de gauge pura, apenas usaremos a ação de glúons (5.53d). Naturalmente, para o caso de um cálculo de QCD completo é necessário considerar também o termo fermiônico (5.53b). Entretanto, existe uma aproximação muito conveniente denominada quenched* que nos permite construir as variáveis de ligação também com o peso da ação de gauge pura. Assim, toda a teoria que será desenvolvida nesta seção para construir as configurações de gauge será utilizada sem nenhuma alteração quando estivermos lidando com a determinação do espectro de hádrons.

6.1 Loops de Wilson

Um observável físico deve ser invariante por transformação de gauge. Na Seção 5.5.1 vimos que o traço de um caminho fechado do produto ordenado de variáveis de ligação (5.42) é invariante por transformação de gauge. Um loop de Wilson é definido como um caminho fechado de produto ordenado.[12,18] Uma vez definido um loop de Wilson, também podemos definir uma função para o loop de Wilson. Assim, inicialmente consideremos um caminho C (veja Figura 5). Então uma função loop de Wilson é definida por

$$W(C) = \frac{1}{3}\mathrm{Tr}\left[U_\mu(n)U_\nu(n+\hat{\mu})\ldots U_\nu(n)^\dagger\right] . \tag{6.2}$$

* Veja a Seção 7.3.

O observável físico "operador plaqueta" é definido como a parte real da função loop de Wilson para o caminho C mais simples (não trivial)

$$\begin{aligned} P_{\mu\nu}(n) &= \frac{1}{3}\mathrm{Re}\ \mathrm{Tr}\left[U_\mu(n)U_\nu(n+\hat{\mu})U_\mu(n+\hat{\nu})^\dagger U_\nu(n)^\dagger\right] \\ &= \frac{1}{3}\mathrm{Re}\ \mathrm{Tr}\, U_{\mu\nu}(n)\,, \end{aligned} \tag{6.3}$$

onde $U_{\mu\nu}(n)$ é dado por (5.44).

Para calcular o "operador plaqueta" será conveniente inicialmente estudarmos o método de *Monte Carlo*.

6.2 Método de Monte Carlo

O método de Monte Carlo consiste em utilizar uma amostragem compacta para calcular o valor esperado de uma grandeza de interesse. Assim, quando formos calcular o valor de qualquer observável físico não precisaremos considerar todas as configurações de gauge possíveis neste cálculo, pois naturalmente um cálculo exato de qualquer grandeza física é impossível de ser realizado por esse método na prática. Neste sentido, o método de Monte Carlo faz uso de uma sub-amostragem de configurações de gauge que obedeça à distribuição de probabilidade adequada (ação de gauge pura) e que contenha o máximo de informação física (configurações não correlacionadas), permitindo deste modo aproximar o valor esperado da grandeza de interesse.[19] Mais precisamente, não existe restrição para usar configurações correlacionadas no método de Monte Carlo, contudo, isto aumenta o custo computacional para realizar medidas que não trazem nova informação ao observável físico de interesse e também aumenta o seu erro estatístico, portanto, diminui a eficiência do método.

Agora consideremos um observável físico descrito pelo operador O. Seu valor esperado exato é dado por

$$\langle O\rangle = \lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} O[U_n]\,, \tag{6.4}$$

onde as variáveis de ligação U_n são amostradas de acordo com a distribuição de probabilidade[†]

$$dP(U) = \frac{\mathrm{e}^{-S[U]}D(U)}{\int D(U)\mathrm{e}^{-S[U]}}\,, \tag{6.5}$$

a assim chamada *medida de Gibbs*. As configurações de gauge U_n são variáveis aleatórias. O método de Monte Carlo aproxima $\langle O\rangle$ usando uma amostra de N_{cf} tais configurações,

† Lembre que nos restringiremos a construções de configurações de gauge com o peso da ação de gauge pura, ou seja, neste trabalho apenas usaremos $S[U]$ em (6.5) igual a $S_G[U]$ dado por (5.53d).

isto é,

$$\langle O \rangle \approx \frac{1}{N_{\rm cf}} \sum_{n=1}^{N_{\rm cf}} O[U_n] \,. \tag{6.6}$$

Em cálculos reais, o número $N_{\rm cf}$ pode variar de poucas dezenas até alguns milhões, dependendo do recurso computacional disponível e da complexidade do problema. O erro estatístico do resultado se comporta como

$$\text{erro} \sim 1/\sqrt{N_{\rm cf}} \,. \tag{6.7}$$

Essa é uma consequência essencialmente do teorema central do limite. Em contraste, existem outros métodos determinísticos tradicionais cuja taxa de convergência é da ordem, por exemplo, de $1/N_{\rm cf}^4$ ou $e^{-N_{\rm cf}}$, etc. Portanto, o método de Monte Carlo deve ser usado apenas em problemas extremamente complicados em que todas as outras alternativas numéricas se comportem de maneira ainda pior do que um erro de $1/\sqrt{N_{\rm cf}}$.

Para ilustrar essa situação, considere o problema de integração numérica em d dimensões. Para o método determinístico tal como a regra de Simpson o erro estatístico se comporta como $N_{\rm cf}^{-4/d}$ (para integrandos suaves). Assim, em baixas dimensões ($d < 8$) este método é consideravelmente melhor que o método de Monte Carlo. Contudo, em altas dimensões ($d > 8$) ele é muito pior. De fato, o método de Monte Carlo é a melhor alternativa para problemas de integração em dimensão $d \gtrsim 10$. Assim, o método de Monte Carlo é a principal ferramenta numérica para resolver as integrais de trajetória de sistemas em teoria quântica de campos.

Em QCD na rede os erros não são somente devidos ao número limitado de configurações utilizadas no método de Monte Carlo. Uma vez que se trabalha com tamanhos finitos de volume e espaçamento da rede, estas são também fontes de erros nos resultados de observáveis físicos. Deste modo, o controle de erros estatísticos (e sistemáticos) é fundamental em qualquer cálculo de observável físico.

6.3 Construção de Configurações de Gauge

Agora descreveremos alguns algoritmos cuja finalidade é construir as tais configurações de gauge que são utilizadas nos cálculos de observáveis físicos. Inicialmente descreveremos o algoritmo mais simples, popularmente conhecido por *Metropolis*, em que basicamente construímos um elemento X de SU(3) próximo à identidade e fazemos uma transformação do campo de gauge por $XU_\mu(n)$; em seguida usamos uma regra de seleção que aceita o novo campo de acordo com o peso da ação de gauge pura. Um outro algoritmo mais eficiente para atualizar os campos de gauge será o *pseudo banho térmico*. Nesse caso, são construídos os campos de gauge com a distribuição adequada e todos os campos são aceitos, diferentemente do que ocorre com o método de Metropolis. Além disso, também

é possível fazer uma etapa adicional ao final do algoritmo de pseudo banho térmico, denominada *sobre-relaxação*, que ajuda a diminuir a correlação entre as configurações.

Para construir as configurações de gauge também se podem combinar os diferentes algoritmos disponíveis. Idealmente seria desejado usar os diferentes algoritmos da maneira mais eficiente possível, no entanto, não é possível saber, a priori, como deve ser essa combinação dos algoritmos ou até mesmo os parâmetros adequados de cada algoritmo. Assim, podem se fazer testes variando a maneira de atualizar os campos de gauge e avaliar a maneira mais eficiente dentre as testadas. Os testes consistem em analisar a equilibração de algum observável físico, naturalmente o mais simples possível, que, como devemos esperar, é o observável plaqueta.

O equilíbrio é alcançado sempre que determinada grandeza física deixa de variar apreciavelmente em passos sucessivos da atualização. Contudo, devemos sempre ter em mente que todas as medidas deverão possuir flutuações devido à natureza quântica do sistema. Idealmente, cada observável físico possui suas particularidades e, assim, as condições ideias para cada um deles são diferentes. Porém, não é possível fazer os testes para cada um deles, devido ao alto custo computacional, e assim é melhor extrapolar o resultado do observável físico mais simples para os outros mais complicados, pois é esperado que não ocorram mudanças tão drásticas ao mudarmos o observável.

Agora, antes de descrever os algoritmos para a construção de configurações de gauge, vale a pena mencionar que em simulações numéricas se trabalha com redes finitas. Assim, condições de contorno devem ser implementadas. Para os campos de gauge aplicaremos condições de contorno periódicas

$$\begin{aligned} U_\mu(N, n_2, n_3, n_4) &= U_\mu(0, n_2, n_3, n_4) \\ U_\mu(n_1, N, n_3, n_4) &= U_\mu(n_1, 0, n_3, n_4) \\ U_\mu(n_1, n_2, N, n_4) &= U_\mu(n_1, n_2, 0, n_4) \\ U_\mu(n_1, n_2, n_3, N_t) &= U_\mu(n_1, n_2, n_3, 0)\,. \end{aligned} \tag{6.8}$$

6.3.1 Algoritmo de Metropolis

O algoritmo de Monte Carlo mais famoso e amplamente utilizado é o algoritmo de Metropolis. Ele foi introduzido por Nicolas Metropolis e seus colegas de trabalho em um artigo de 1953 sobre gases de esferas maciças.[20] Ele pode ser utilizado em qualquer aplicação do método de Monte Carlo, incluindo o modelo de Ising,[21] e naturalmente também ao nosso interesse particular que é a construção de configurações de gauge com a distribuição de gauge pura.[12]

A elaboração do algoritmo de Metropolis pode ser vista nas referências citadas no parágrafo anterior. Aqui será apresentado apenas o procedimento geral que se deve

realizar para construir as configurações de gauge necessárias para o cálculo de observáveis físicos em QCD na rede.

Assim, se desejamos construir uma configuração de gauge SU(3) com o peso da ação $S_G[U]$ dada pela Equação (5.53d), devemos inicialmente começar com alguma configuração U e atualizar essa configuração até conseguirmos alcançar uma configuração final que obedeça ao peso desejado.

Para a configuração inicial podemos definir todas as variáveis de ligação iguais à identidade ou simplesmente construir elementos aleatórios de SU(3) para colocar na ligação entre sítios vizinhos da rede. Mais precisamente, podemos até mesmo colocar metade de matrizes identidade e metade de matrizes SU(3) aleatórias. Não existe restrição em relação à configuração inicial, basta serem elementos de SU(3). Se decidirmos começar por uma configuração de matrizes identidade, então teremos uma inicialização denominada *fria*, por outro lado, se começarmos a partir de matrizes SU(3) aleatórias, a inicialização é denominada *quente*.

Naturalmente, sempre desejamos começar com uma configuração que melhor se aproxime à configuração de equilíbrio. Contudo, não temos como saber, a priori, qual é o melhor tipo de começo, assim, podemos realizar diferentes simulações para diferentes configurações iniciais e testar quais dessas inicializações é a mais eficiente, isto é, a que mais rapidamente se aproxima do equilíbrio.

Uma vez inicializado o sistema, devemos fazer uma varredura em toda rede e atualizar as matrizes de ligação U para U'. Para o campo $U_\mu(n)$ fazemos uma transformação $U_\mu(n) \to U_\mu(n)'$. Para decidirmos se manteremos essa nova variável de ligação, precisamos saber como a ação varia com essa nova configuração. Cada variável de ligação é compartilhada apenas por seis plaquetas, assim, a variação da ação é afetada apenas pela contribuição local da ação que envolve essas plaquetas compartilhadas. Deste modo, considere a contribuição local para a ação

$$\begin{aligned} S[U_\mu(n)']_{\text{loc}} &= \frac{\beta}{3}\sum_{i=1}^{6}\text{Re Tr}\left[\mathbb{1} - U_{\mu\nu}(n)'P_i\right] = \frac{\beta}{3}\text{Re Tr}\left[6\,\mathbb{1} - U_{\mu\nu}(n)'A\right] , \\ \text{com } A &= \sum_{i=1}^{6} P_i = \sum_{\nu\neq\mu}\Big[U_\nu(n+\hat{\mu})U_\mu(n+\hat{\nu})^\dagger U_\nu(n)^\dagger \\ &\qquad + U_\nu(n+\hat{\mu}-\hat{\nu})^\dagger U_\mu(n-\hat{\nu})^\dagger U_\nu(n-\hat{\nu})\Big] . \end{aligned} \tag{6.9}$$

Note que P_i é o produto de três variáveis de ligação que formam a plaqueta i junto com $U_\mu(n)'$. Esses produtos são denominados *staples* (grampos) e a soma de todos os staples é escrita como A.

A variação da ação é dada por

$$\Delta S = S[U_\mu(n)']_{\text{loc}} - S[U_\mu(n)]_{\text{loc}} = -\frac{\beta}{3}\text{Re Tr}\left[U_{\mu\nu}(n)' - U_{\mu\nu}(n)\right]A\,, \tag{6.10}$$

onde A não é afetado pela transformação $U_\mu(n) \to U_\mu(n)'$.

Uma vez realizada uma transformação na variável de ligação $U_\mu(n) \to U_\mu(n)'$ e calculada a respectiva variação da ação ΔS, o algoritmo de Metropolis irá nos dizer se devemos aceitar essa nova configuração ou manter a configuração inicial. Nesse passo devemos sortear um número aleatório r uniformemente distribuído no intervalo $[0, 1)$ e aceitar a nova configuração se $r \leq \exp(-\Delta S)$ e rejeitar caso contrário.

A escolha do candidato $U_\mu(n)'$ é uma tarefa fundamental do algoritmo de Metropolis. Queremos um elemento de SU(3) que não seja muito distante do antigo campo $U_\mu(n)$, pois senão teríamos uma taxa de aceitação de novas configurações muito pequena. Por outro lado, também queremos que a nova configuração seja o mais distante possível da configuração inicial, a fim de alcançar o equilíbrio mais rapidamente. Portanto, precisamos encontrar uma relação de harmonia entre a taxa de aceitação e a mudança nas variáveis de ligação. Isto pode ser estimado através de testes pela análise da equilibração.

A construção de $U_\mu(n)'$ é realizada da seguinte maneira:

$$U_\mu(n)' = XU_\mu(n)\,, \tag{6.11}$$

onde X é um elemento de SU(3) na vizinhança da identidade. O elemento X deve ser escolhido a partir de uma amostragem contendo pares de matrizes X e X^{-1}. Em geral é adequado e suficiente que essa amostragem contenha algumas centenas de elementos SU(3).

Portanto, o algoritmo de Metropolis é baseado em simples procedimentos que se resumem por:

Passo 1: Sortear um elemento X a partir de uma amostragem contendo pares de matrizes X e X^{-1} de SU(3).

Passo 2: Escolher um campo de gauge para atualizar na rede, por exemplo, $U_\mu(n) \to U_\mu(n)' = XU_\mu(n)$.

Passo 3: Calcular a soma de staples e em seguida a variação da ação ΔS com o uso da Equação (6.10).

Passo 4: Sortear um número aleatório r uniformemente distribuído no intervalo $[0, 1)$ e aceitar a nova configuração se $r \leq \exp(-\Delta S)$ e rejeitar caso contrário.

Passo 5: Repita desde o começo esses passos.

Geralmente escolhemos um critério para visitar as variáveis de ligação em (n, μ). Também é conveniente repetirmos algumas vezes a atualização de um determinado candidato, uma vez que usaremos os mesmos staples já previamente determinados para calcular a

variação da ação devido aos novos campos de gauge na mesma posição. Essa modificação é denominada *algoritmo de Metropolis de múltiplas tentativas*.

Agora que descrevemos o algoritmo de Metropolis, ainda precisamos mostrar como são construídos os elementos X de SU(3).

6.3.2 Representações de Elementos de Grupos

Os elementos X de SU(3) não são construídos diretamente, na verdade são utilizados elementos de SU(2) para construir X. Assim, inicialmente será conveniente descrevermos as representações adequadas de elementos de SU(2) e SU(3)[‡].

Os elementos de SU(2) são unitários, o que impõe certas restrições às variáveis desses elementos. Por exemplo, uma matriz de SU(2) possui 4 entradas que podem ser valores complexos, desta forma, podemos pensar inicialmente que devemos armazenar 8 valores para construir cada matriz SU(2). Mas devido às restrições impostas pela unitariedade, precisamos armazenar apenas, no mínimo, o valor da quantidade de geradores, a saber, 3 valores. Portanto, com três valores podemos construir qualquer elemento SU(2). No entanto, não é conveniente armazenarmos apenas 3 valores, pois gastaríamos mais tempo realizando operações matemáticas a fim de saber o valor de cada entrada da matriz. Portanto, precisamos escolher uma representação de SU(2) que seja o mais eficiente possível para trabalhar computacionalmente e decidir o quanto de informação deveremos armazenar. Dessa forma, também podemos armazenar a primeira linha de uma matriz SU(2)

$$U = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \quad \text{com} \quad |a|^2 + |b|^2 = 1\,. \tag{6.12}$$

Isto corresponde a armazenar dois números complexos, ou seja, armazenar 4 valores reais ao invés do mínimo de 3 valores. Com $a = x_0 + ix_3$ e $b = x_2 + ix_1$, isto é o mesmo que usar o vetor $x = (x_0, \vec{x})$ de quatro coeficientes reais na representação

$$U = x_0 \mathbb{1} + i\vec{x} \cdot \vec{\sigma} \quad \text{com} \quad \det[U] = |x|^2 = |x_0|^2 + |\vec{x}|^2 = \sum_{i=0}^{3} x_i^2 = 1\,, \tag{6.13}$$

onde $\vec{\sigma}$ denota o vetor das três matrizes de Pauli

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad , \quad \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad , \quad \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\,. \tag{6.14}$$

Para o grupo SU(3), uma maneira de representar os elementos é utilizar dois vetores $\vec{u}$ e $\vec{v}$. Nesse caso precisaremos armazenar 6 números complexos = 12 números reais [o valor mínimo de parâmetros seria 8 = número de geradores de SU(3)]. Devido às propriedades

‡ Veja o apêndice C.

de SU(3), deveremos restringir esses vetores à unidade e eles devem ser ortogonais, isto é,

$$\begin{aligned} |\vec{u}|^2 &= \vec{u}^* \cdot \vec{u} = |u_1|^2 + |u_2|^2 + |u_3|^2 = 1 \\ |\vec{v}|^2 &= \vec{v}^* \cdot \vec{v} = |v_1|^2 + |v_2|^2 + |v_3|^2 = 1 \\ (\vec{u}, \vec{v}) &= \vec{u}^* \cdot \vec{v} = u_1^* v_1 + u_2^* v_2 + u_3^* v_3 = 0\,. \end{aligned} \tag{6.15}$$

Além disso, a terceira linha da matriz pode ser construída a partir das duas primeiras por

$$U = \begin{pmatrix} \vec{u} \\ \vec{v} \\ \vec{u}^* \times \vec{v}^* \end{pmatrix}. \tag{6.16}$$

Assim, em principio é suficiente armazenar apenas as duas primeiras linhas.

Independentemente da escolha da representação, durante a construção das variáveis de ligação sempre ocorrerá um acúmulo de erros de arrendondamento devido às operações realizadas. Assim, as matrizes devem ser projetadas à unitariedade regularmente. Para tal finalidade podemos aplicar o método bem conhecido denominado Gram-Schmidt. A primeira linha é normalizada, a segunda é construída a partir dos valores ortogonalizados da primeira linha,

$$\begin{aligned} \vec{u}_{\text{novo}} &= \vec{u}/|\vec{u}|\,, \\ \vec{v}_{\text{novo}} &= \vec{v}\,'/|\vec{v}\,'|\,, \quad \text{onde} \quad \vec{v}\,' = \vec{v} - \vec{u}_{\text{novo}}(\vec{v} \cdot \vec{u}^*_{\text{novo}})\,, \end{aligned} \tag{6.17}$$

e a terceira linha é construída a partir das duas primeiras linhas como em (6.16).

Para escolhermos uma representação e a quantidade de informação a ser armazenada, temos que levar em conta o tamanho da rede e o recurso computacional disponível. Neste estudo, em particular, sempre armazenaremos todas as entradas das variáveis de ligação. Por exemplo, para o cálculo do valor esperado da variável plaqueta usaremos uma rede de tamanho 16^4, assim o custo para armazenar todas as informações de uma configuração de campos de gauge será 38 MB[§] de memória, o que naturalmente não representa muito esforço para um notebook atual.

6.3.3 Candidato para a Atualização de Metropolis

Agora devemos descrever um procedimento para construir um elemento X de SU(3) na vizinhança da identidade, que será utilizado na determinação do campo de gauge $U_\mu(n)' = XU_\mu(n)$, candidato a ser atualizado na rede.

Como já mencionamos na Seção 6.3.2, os elementos de SU(3) são construídos a partir de elementos SU(2). Assim, devemos inicialmente descrever um método para a determinação de elementos SU(2) na vizinhança da identidade. Para isto, podemos escolher

§ Ponteiro no fortran em double complex.

quatro números aleatórios r_i uniformemente distribuídos em $(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$. A matriz $X_{\mathrm{SU}(2)}$ é então construída seguindo (6.13) com x_0 e $\vec{x}$ dado por

$$\vec{x} = \epsilon\vec{r}/|\vec{r}| \quad , \quad x_0 = \mathrm{sinal}(r_0)\sqrt{1-\epsilon^2}\,, \tag{6.18}$$

onde ϵ é um parâmetro que controla a extensão de $X_{\mathrm{SU}(2)}$ em torno de $\mathbb{1}$.

Para SU(3), as matrizes X podem ser construídas a partir de elementos de SU(2) embebidos em matrizes 3×3 de acordo com

$$R = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & 0 \\ r_{21} & r_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad , \quad S = \begin{pmatrix} s_{11} & 0 & s_{12} \\ 0 & 1 & 0 \\ s_{21} & 0 & s_{22} \end{pmatrix} \quad , \quad T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & t_{11} & t_{12} \\ 0 & t_{21} & t_{22} \end{pmatrix}, \tag{6.19}$$

onde os elementos de matriz não nulos representam as matrizes SU(2), próximas à identidade, como descrito acima. Uma escolha para X é dada por

$$X = RST\,. \tag{6.20}$$

Uma vez que as matrizes R, S e T são próximas à identidade, então o produto X também será.

O algoritmo de Metropolis propõe que seja sorteada uma matriz X numa amostragem contendo pares de matrizes X e X^{-1}, então é conveniente construirmos uma certa quantidade de matrizes X e depois incluir nessa coleção $X^\dagger = X^{-1}$. Depois sempre podemos sortear uma matriz dessa amostragem no passo 1 do algoritmo de Metropolis. Também é conveniente que após uma certa quantidade de atualizações na rede, reconstruímos um novo conjunto de matrizes X a serem utilizadas na atualização dos campos de gauge.

6.3.4 Pseudo Banho Térmico

O algoritmo de pseudo banho térmico permite construir os campos de gauge sem nenhuma etapa de aceitação como ocorre com Metropolis. Assim, todas as configurações são aceitas. Ele é consideravelmente mais eficiente que o algoritmo de Metropolis como poderá ser visto quando analisarmos os resultados do observável plaqueta.

A palavra pseudo se deve ao fato de que utilizaremos um algoritmo de banho térmico desenvolvido para o grupo SU(2). Assim, para o caso de elementos SU(3) será necessário inicialmente transformar o problema de SU(3) em um problema de SU(2), para em seguida ser utilizado o algoritmo do banho térmico.[22] Esse é o procedimento padrão normalmente adotado em simulações de QCD na rede. Note que, como pode ser visto na referência,[23] também existe um procedimento geral de banho térmico para lidar diretamente com elementos de SU(3), mas esse procedimento é pouco prático e, deste modo, não muito utilizado.

Assim como foi feito para o algoritmo de Metropolis, apenas apresentaremos o procedimento geral que se deve realizar para construir as configurações de gauge utilizando

o algoritmo de pseudo banho térmico. Portanto, começamos descrevendo inicialmente a distribuição de probabilidade local.

$$dP(U) = dU \exp\left\{\frac{\beta}{3}\text{Re tr}[U_\mu(n)A_\mu(n)]\right\} , \tag{6.21}$$

onde $U_\mu(n) \in$ SU(3) é o campo de gauge a ser atualizado e A é a soma de todos os staples, dada por (6.9).

Se estivéssemos trabalhando com elementos de SU(2), então teríamos uma propriedade importante que é utilizada na construção do algoritmo banho térmico: a soma de dois elementos de SU(2) é proporcional a um elemento de SU(2). Portanto, a soma de staples $A_{\text{SU(2)}}$ é proporcional a um elemento de SU(2). Contudo, para o grupo SU(3) essa propriedade não é mais válida.

A ideia central do algoritmo de pseudo banho térmico é justamente transformar a distribuição de probabilidade local (6.21) envolvendo somas de elementos de SU(3) numa outra densidade de probabilidade local, porém, envolvendo somas de elementos de SU(2).

$$dP(U) \to dU_{\text{SU(2)}} \exp\left\{\frac{\beta}{3}\text{Re tr}[U_{\text{SU(2)}}(n)' A_{\text{SU(2)}}(n)]\right\} . \tag{6.22}$$

Em seguida poderemos aplicar o algoritmo de banho térmico desenvolvido para elementos de SU(2) para calcular $U_{\text{SU(2)}}(n)'$.[4] A matriz de SU(3) que estamos interessados é construída a partir de três matrizes de SU(2) como mostrado em (6.19) e (6.20), portanto, na realidade transformaremos um problema de banho térmico de elementos de SU(3) em três problemas de banho térmico para elementos de SU(2). Na prática, esses três problemas são resolvidos de maneira muito similar e a partir de um algoritmo bem mais simples que o banho térmico desenvolvido para elementos de SU(3).

6.3.5 Transformando o Problema de SU(3) para SU(2)

Para entender como é realizada a transformação do banho térmico de elementos SU(3) para elementos SU(2), primeiro escrevemos o campo de gauge atualizado como[¶]

$$U' = TSRU , \tag{6.23}$$

lembrando que R, S, T são as matrizes de SU(3) construídas a partir de elementos SU(2) [veja Equação (6.19)]. Assim, consideramos inicialmente T e S iguais à identidade. Se utilizarmos as propriedades da medida de Haar[‖] [veja Equação (D.8)], temos que

$$\begin{aligned} dP(U) &= dU \exp\left[\frac{\beta}{3}\text{Re tr}(UA)\right] = d(RU) \exp\left[\frac{\beta}{3}\text{Re tr}(RUA)\right] \\ &= dR \exp\left[\frac{\beta}{3}\text{Re tr}(RW_R)\right] , \end{aligned} \tag{6.24}$$

¶ Será escrito $U_\mu(n)$ para U, para simplificar a notação.

‖ Veja o apêndice D.

onde $W_R = UA$. Como R tem embebida uma matriz de SU(2), então podemos utilizar a representação em (6.12) e escrever R como

$$R = \begin{pmatrix} r_1 & r_2 & 0 \\ -r_2^* & r_1^* & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} . \tag{6.25}$$

Assim, temos que

$$\begin{aligned} \mathrm{Re\ tr}(RW_R) &= \mathrm{Re}\left(r_1 w_{11} + r_2 w_{21} - r_2^* w_{12} + r_1^* w_{22} + w_{33}\right) \\ &= \mathrm{Re}(r_1)\mathrm{Re}(w_{11} + w_{22}) + \mathrm{Im}(r_1)\mathrm{Im}(w_{22} - w_{11}) \\ &+ \mathrm{Re}(r_2)\mathrm{Re}(w_{21} - w_{12}) - \mathrm{Im}(r_2)\mathrm{Im}(w_{21} + w_{12}) + w_{33} \,. \end{aligned} \tag{6.26}$$

O termo w_{33} pode ser absorvido na normalização. Agora se considerarmos o caso do banho térmico de SU(2), então $W_{\mathrm{SU(2)}}$ também será um elemento de SU(2). Utilizando a mesma representação como anteriormente, obtemos o expoente

$$2\left[\mathrm{Re}(r_1)\mathrm{Re}(w_1) - \mathrm{Im}(r_1)\mathrm{Im}(w_1) - \mathrm{Re}(r_2)\mathrm{Re}(w_2) - \mathrm{Im}(r_2)\mathrm{Im}(w_2)\right] . \tag{6.27}$$

De fato, se definirmos

$$\begin{aligned} w_1^{(\mathrm{R})} &\equiv \frac{\mathrm{Re}(w_{11} + w_{22}) + i\,\mathrm{Im}(w_{11} - w_{22})}{2} \\ w_2^{(\mathrm{R})} &\equiv \frac{\mathrm{Re}(w_{12} - w_{21}) + i\,\mathrm{Im}(w_{12} + w_{21})}{2} , \end{aligned} \tag{6.28}$$

o expoente se torna exatamente o mesmo. Assim, podemos transformar nossa distribuição de probabilidade em

$$dP(U) = dR_{\mathrm{SU(2)}} \exp\left(\frac{\beta}{3}\mathrm{Re\ tr}[R_{\mathrm{SU(2)}} W_{\mathrm{SU(2)}}]\right) , \tag{6.29}$$

onde os elementos de $W_{\mathrm{SU(2)}}$ são dados em (6.28) e lembrando que estamos utilizando a representação em (6.12) para matrizes de SU(2).

O próximo passo será utilizar o algoritmo do banho térmico para determinar $R_{\mathrm{SU(2)}}$. Deste modo, obtemos $U' = RU$. A seguir devemos realizar o mesmo procedimento fazendo R e T iguais à identidade, ou seja, fazemos a substituição $RW_R \to SW_S$, onde $W_S = RUA$. Se repetirmos o procedimento anterior para transformar o expoente da distribuição de probabilidade, vemos que agora os elementos da matriz $W_{\mathrm{SU(2)}}$ se tornam

$$\begin{aligned} w_1^{(\mathrm{S})} &\equiv \frac{\mathrm{Re}(w_{11} + w_{33}) + i\,\mathrm{Im}(w_{11} - w_{33})}{2} \\ w_2^{(\mathrm{S})} &\equiv \frac{\mathrm{Re}(w_{13} - w_{31}) + i\,\mathrm{Im}(w_{13} + w_{31})}{2} . \end{aligned} \tag{6.30}$$

Uma vez determinado $S_{\mathrm{SU(2)}}$, obtemos o campo atualizado por $U' = SRU$. E por fim, devemos igualar R e S à identidade e determinar T. Neste caso, os elementos da matriz

$W_{\mathrm{SU}(2)}$ se tornam

$$\begin{aligned} w_1^{(\mathrm{T})} &\equiv \frac{\mathrm{Re}(w_{22}+w_{33})+i\,\mathrm{Im}(w_{22}-w_{33})}{2} \\ w_2^{(\mathrm{T})} &\equiv \frac{\mathrm{Re}(w_{23}-w_{32})+i\,\mathrm{Im}(w_{23}+w_{32})}{2}\,. \end{aligned} \tag{6.31}$$

Agora aplicando o banho térmico para determinar $T_{\mathrm{SU}(2)}$, conseguimos realizar a atualização completa do campo de gauge dada por (6.23). Naturalmente devemos realizar esse procedimento para todos os campos de gauge para atualizar a rede.

6.3.6 Algoritmo de Banho Térmico para Elementos SU(2)

Como já foi mostrado o procedimento para transformar o problema do banho térmico de elementos SU(3) para elementos SU(2), falta apenas descrever o algoritmo de banho térmico para elementos de SU(2).

Considere a distribuição de probabilidade local com a forma de (6.22)

$$dP(U) = dU \exp\left[\frac{\beta}{3}\mathrm{Re}\ \mathrm{tr}(UW)\right]\,,$$

onde nesta seção as matrizes U e W se referem a elementos de SU(2). Estamos interessados em determinar U conhecendo W. Como W é proporcional a um elemento de SU(2), então podemos escrevê-lo como

$$W = \alpha V \quad \text{com} \quad \alpha = \sqrt{\det W}\,, \tag{6.32}$$

onde $V \in \mathrm{SU}(2)$ e $\sqrt{\det W} \geq 0$. Agora podemos escrever a distribuição de probabilidade local como

$$dP(U) = dU \exp\left[\frac{\alpha\beta}{3}\mathrm{Re}\ \mathrm{tr}(UV)\right]\,,$$

Usando a propriedade da medida de Haar (D.5), podemos reescrever a distribuição de probabilidade local como

$$dP(X) = dX \exp\left[\frac{\alpha\beta}{3}\mathrm{Re}\ \mathrm{tr}(X)\right]\,, \tag{6.33}$$

onde $X = UV$.

Portanto, o problema é reduzido a gerar X com a distribuição (6.33). Para tal finalidade, podemos realizar o seguinte procedimento:

Passo 1: Sorteie um número aleatório r uniformemente distribuído em $[0,1)$

Passo 2: Sorteie um grupo de três números aleatórios $r_i, i = 1,2,3$ uniformemente distribuídos em $(0,1]$ (i.e., o valor 0 deve ser evitado); uma vez que os geradores de números aleatórios cobrem o intervalo $[0,1)$, então apenas tome os valores $r_i \to 1 - r_i$.

Passo 3: Calcule λ^2 definido por

$$\lambda^2 = -\frac{3}{4\alpha\beta}\left[\ln(r_1) + \cos^2(2\pi r_2)\ln(r_3)\right] . \tag{6.34}$$

O valor de λ deve ser aceito apenas se

$$r^2 \leq 1 - \lambda^2 . \tag{6.35}$$

Se o valor de λ for aceito, então faça $x_0 = 1 - 2\lambda^2$, senão retorne ao passo 2.

Passo 4: Sorteie um grupo de três números aleatórios $s_i, i = 1, 2, 3$ uniformemente distribuídos em $[-1, 1)$ (uma vez que os geradores de números aleatórios cobrem o intervalo $[0, 1)$, então apenas tome os valores $s_i \to 2s_i - 1$) e aceite-os apenas quando $s_1^2 + s_2^2 + s_3^2 \leq 1$. Esse 3-vetor deve ser normalizado ao comprimento $|\vec{x}| = \sqrt{1 - x_0^2}$, isto é,

$$x_i = \frac{\sqrt{1 - x_0^2}}{\sqrt{s_1^2 + s_2^2 + s_3^2}} s_i , \qquad i = 1, 2, 3. \tag{6.36}$$

Passo 5: Após esses passos, terminamos com um vetor $(x_0, \vec{x})$, a partir do qual podemos calcular X usando a representação (6.13).

Uma vez determinado X, podemos calcular U por

$$U = X\frac{W^\dagger}{\alpha} . \tag{6.37}$$

6.3.7 Sobre-relaxação

Uma vez que usamos os staples das configurações anteriores para gerar uma nova configuração, existirá correlação entre as configurações. A sobre-relaxação é um procedimento simples, que podemos aplicar ao final do pseudo banho térmico e que ajudará a diminuir a correlação entre as configurações. A ideia é selecionar uma nova configuração que seja igualmente provável à proposta pelo pseudo banho térmico, mas que esteja mais "distante" dela. Existem muitas maneiras diferentes de construir essa nova configuração, como por exemplo fazer simplesmente alguma transformação de gauge, pois isso manterá a ação fixa. Contudo, utilizaremos a abordagem proposta por Creutz.[24]

Após aplicarmos o algoritmo de pseudo banho térmico como já descrito, poderá ser aplicado opcionalmente o procedimento de sobre-relaxação. Neste caso usamos os staples já previamente calculados no pseudo banho térmico e fazemos sua projeção para o grupo SU(3). Podemos usar o procedimento de Gram-Schmidt (6.17) para essa finalidade. Em seguida calculamos o transposto conjugado da projeção e o chamamos de g_0. Então propomos $U' = g_0 U^\dagger g_0$.

Olhando para a transformação de gauge (5.26), vemos que o novo campo proposto em nosso procedimento de sobre-relaxação não satisfaz a invariância de gauge, logo a ação

também irá sofrer uma variação**. Deste modo, se sempre aceitarmos o campo proposto no procedimento de sobre-relaxação terminaremos com uma configuração que não satisfaz a distribuição de probabilidade adequada. Portanto, devemos realizar algum procedimento para corrigir esse problema. Aqui podemos realizar um simples procedimento de Metropolis para decidir se aceitar ou não o novo campo proposto pela sobre-relaxação.

6.4 Valor Esperado do Operador Plaqueta

Agora que já discutimos o método de Monte Carlo para fazer uma aproximação estatística de um observável físico e alguns procedimentos para construir as configurações de gauge usadas no método de Monte Carlo, podemos calcular algum observável físico simples. Contudo, ainda ficará faltando uma discussão sobre os métodos de análise dos resultados para estimar os erros estatísticos. Essa discussão será realizada após mostrarmos o cálculo do valor esperado do operador plaqueta.

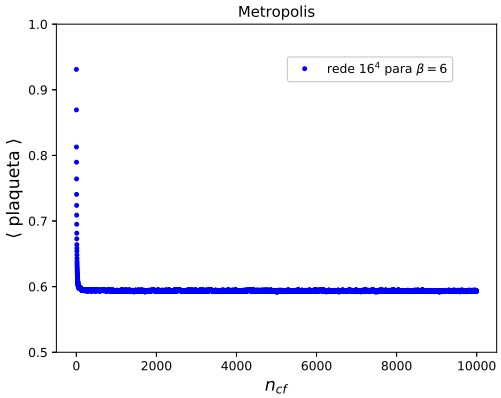

Figura 6 – Cálculo da plaqueta com o algoritmo de Metropolis. O valor médio obtido foi 0.59374. Foram descartadas as 1000 configurações iniciais no cálculo.

Fonte: Elaborada pelo autor.

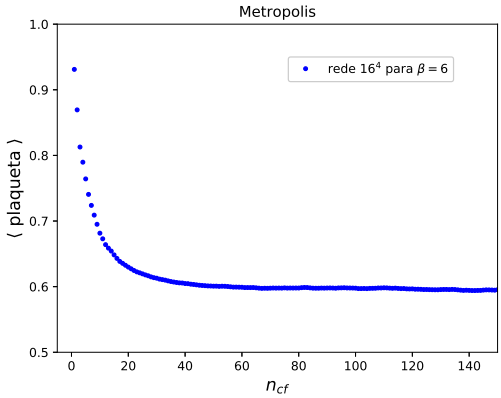

Figura 7 – Cálculo da plaqueta com o algoritmo de Metropolis. Gráfico parcial. Na região da configuração 60 o resultado parece atingir seu valor assintótico.

Fonte: Elaborada pelo autor.

O valor esperado do operador plaqueta depende apenas do valor da constante de acoplamento inverso β (5.54). O tamanho da rede e a quantidade de configurações N_{cf} [veja Equação (6.6)] utilizadas no cálculo serão responsáveis pela precisão que poderá ser alcançada no resultado.[25]

Para o cálculo do operador plaqueta, ao invés de calcular o valor esperado de uma única plaqueta em (6.3), é conveniente calcularmos o valor de todas as plaquetas da rede

** No caso de elementos de SU(2) a escolha usada para g_0 garantiria que a ação permanecesse inalterada, contudo, para outros grupos como SU(3) esse não é o caso. Assim é difícil saber a priori sobre a eficiência do procedimento de sobre-relaxação para o grupo SU(3).

e tomarmos sua média, isto é,

$$\langle \text{plaqueta} \rangle = \frac{1}{6N_t N^3} \sum_{n\in\Lambda} \sum_{\mu<\nu} \frac{1}{3} \text{Re Tr} \left[U_\mu(n) U_\nu(n+\hat{\mu}) U_\mu(n+\hat{\nu})^\dagger U_\nu(n)^\dagger \right] . \tag{6.38}$$

Nesse sentido foram realizadas três simulações diferentes. Uma usando o procedimento de Metropolis e as outras usando o algoritmo de pseudo banho térmico com e sem o procedimento opcional de sobre-relaxação para construir as configurações de gauge.

Os parâmetros fixados em todas as simulações são descritos a seguir. Foi utilizada a inicialização fria (todos os campos de gauge iguais à identidade). A varredura para cada atualização da rede foi feita seguindo o ordenamento da componente x, y, z e t do espaço-tempo e índice de Dirac. Foram calculadas $N_{\text{cf}} = 10000$ configurações diferentes. A reunitarização dos campos de gauge foi realizada a cada $N_{\text{unit}} = 500$ configurações. O tamanho da rede foi 16^4 e a constante de acoplamento inverso $\beta = 6$.

Para o algoritmo de Metropolis foram realizadas 10 tentativas para cada variável de ligação. O parâmetro ϵ em (6.18), que controla a proximidade entre a variável de ligação a ser atualizada e a sua nova candidata, foi $\epsilon = 0.24$. Com isso obtivemos o resultado descrito pela Figura 6.

Ao analisar o gráfico parcial mostrado na Figura 7 se nota que a partir da configuração 60 o resultado do valor esperado já praticamente atingiu o seu valor assintótico. Após isso houve apenas flutuações em torno de um valor médio, como esperado para um sistema quântico.

Para analisar nosso resultado quantitativo podemos compará-lo com alguma referência que tenha feito um estudo extensivo sobre o operador plaqueta. Em particular, Lucini e Teper[25] obtiveram o valor $\langle \text{plaqueta} \rangle = 0.593669(8)$ para uma rede 16^4 com $\beta = 6$. Deste modo, vemos que o valor da nossa simulação é coerente com o valor esperado, possuindo as esperadas flutuações em torno dele. Mais precisamente, fomos capazes de obter um resultado com 3 casas decimais corretas. Uma comparação precisa, no entanto, deve ser feita levando-se em conta os erros nos dois casos. O cálculo do erro para nossas simulações é descrito mais abaixo.

Agora no caso do pseudo banho térmico foi sempre realizada apenas uma tentativa para atualizar cada variável de ligação. O resultado obtido está descrito na Figura 8.

Ao analisar o gráfico parcial mostrado na Figura 9, vemos que a equilibração ocorre mais rapidamente para o algoritmo de pseudo banho térmico e também conseguimos uma casa a mais de precisão do resultado.

E, por fim, a Figura 10 descreve o resultado para a simulação do algoritmo de pseudo banho térmico com a etapa adicional de sobre-relaxação.

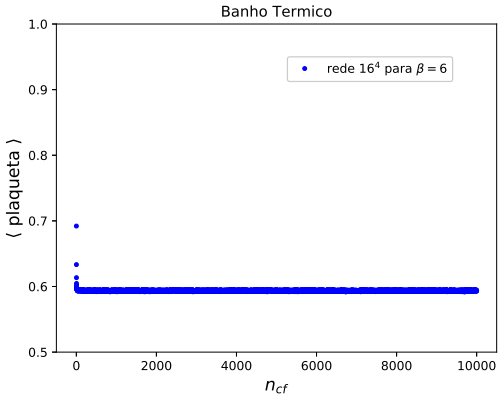

Figura 8 – Cálculo da plaqueta com o algoritmo de pseudo banho térmico. O valor médio obtido foi 0.59367. Foram descartadas as 1000 configurações iniciais no cálculo.

Fonte: Elaborada pelo autor.

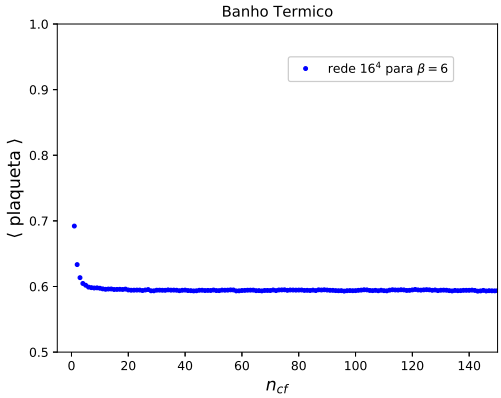

Figura 9 – Cálculo da plaqueta com o algoritmo de pseudo banho térmico. Gráfico parcial. Na região da configuração 10 o resultado parece atingir seu valor assintótico.

Fonte: Elaborada pelo autor.

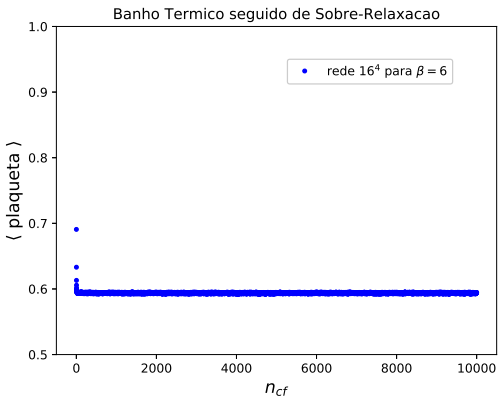

Figura 10 – Cálculo da plaqueta com o algoritmo de pseudo banho térmico com sobre-relaxação. O valor médio obtido foi 0.59369. Foram descartadas as 1000 configurações iniciais no cálculo.

Fonte: Elaborada pelo autor.

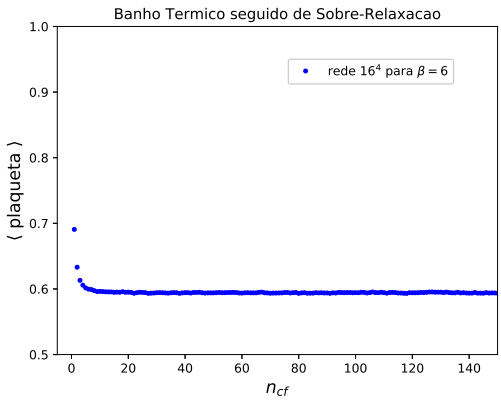

Figura 11 – Cálculo da plaqueta com o algoritmo de pseudo banho térmico com sobre-relaxação. Gráfico parcial. Na região da configuração 10 o resultado parece atingir seu valor assintótico.

Fonte: Elaborada pelo autor.

A etapa adicional de sobre-relaxação não teve contribuições significativas no resultado, como pode ser visto através das Figuras 9 e 11 que são muito parecidas. Mesmo quando calcularmos a correlação entre as configurações também poderá ser notado que não haverá mudanças nítidas no resultado. Como essa etapa tem um custo computacional baixo, como será mostrado a seguir, então a decisão de usar esse procedimento é opcional e não traz mudanças expressivas no resultado final das simulações.

6.5 Detalhes de Simulação

Os algoritmos deste trabalho foram escritos na linguagem fortran 90 e executados com o compilador gfortran com o nível de otimização -O3 para tornar as simulações mais rápidas.[26] As simulações foram realizadas usando uma maquina virtual do Google Cloud. As informações básicas da máquina são 2 vCPUs de 2.2 GHz, 4 GB de memória RAM e disco permanente SSD 30 GB. Plataforma de CPU Intel Broadwell. Contudo, as simulações para a determinação do espectro de hádrons foram realizadas parcialmente por esta configuração da máquina virtual. Uma parte das simulações foi realizada por uma máquina contendo mais vCPUs e memória RAM para rodar mais simulações ao mesmo tempo.

A duração de cada simulação realizada neste trabalho foi gravada para se ter uma ideia do custo computacional envolvido na determinação de diferentes observáveis físicos sob determinadas condições. De fato, as simulações não foram realizadas em condições ideais para permitir uma comparação precisa da duração delas. Portanto, nosso objetivo é obter apenas uma ideia, como mencionado.

Em particular, para o observável plaqueta o principal gasto das simulações foram as atualizações do campo de gauge. O cálculo do valor esperado da plaqueta leva apenas cerca de 0.20 segundos por configuração, ou seja, 0.6 horas por simulação. Contudo, o tempo total da simulação para o algoritmo de Metropolis foi 20.5 horas. A simulação para o pseudo banho térmico durou 6.2 horas e com o procedimento de sobre-relaxação durou 6.9 horas.

Note que o algoritmo de pseudo banho térmico além de ser mais eficiente para construir as configurações de gauge no sentido de conseguir equilibrar o sistema usando menos configurações, é também cerca de 3 vezes mais rápido do que o algoritmo de Metropolis[††] quando usado isoladamente. A seguir será mostrado que as configurações do algoritmo de pseudo banho térmico também são menos correlacionadas que as configurações geradas usando o algoritmo de Metropolis. Portanto, o algoritmo de pseudo banho térmico é consideravelmente melhor que o algoritmo de Metropolis para construir as configurações de gauge, sendo apenas adequado usar Metropolis quando aplicado a um passo intermediário como o procedimento de sobre-relaxação, entretanto, a eficiência desse último procedimento não é sempre garantida quando aplicado ao grupo SU(3).

[††] Mais precisamente, o algoritmo de pseudo banho térmico aplicado uma vez para cada sítio da rede é mais rápido que o algoritmo de Metropolis de múltiplas tentativas aplicado 10 vezes para cada sítio da rede.

6.6 Análise de Dados

A análise estatística dos observáveis medidos é o passo final da simulação numérica. Precisamos saber se fizemos as medidas sobre as condições adequadas para que o método de Monte Carlo seja válido. E naturalmente precisamos saber os erros associados às medidas, senão não temos como interpretar o resultado final.

6.6.1 Parâmetros de Simulação

Uma simulação de Monte Carlo eficiente precisa de configurações no equilíbrio e que não sejam correlacionadas. Nessas condições, poderemos usar (6.6) para aproximar o valor do observável físico. Contudo, ao olhar rapidamente a Figura 7[‡‡], fica claro que leva um certo tempo até o valor esperado de um observável atingir um limite assintótico, a partir do qual as medidas sofrem apenas pequenas flutuações devido à natureza quântica do sistema. Quando as medidas atingem essa região de pequenas flutuações, significa que o sistema atingiu o equilíbrio.

Em qualquer simulação de Monte Carlo é conveniente realizar as medidas apenas no equilíbrio. Assim, o número de termalizações N_{ter} é um parâmetro de simulação que nos diz a quantidade de configurações de gauge iniciais que deveremos descartar. Após descartar essas configurações, estaremos com o sistema no equilíbrio e poderemos realizar as medidas. Uma estimativa de N_{ter} pode ser feita a olho, por exemplo, a partir da Figura 7 podemos afirmar que 1000 é um bom valor para o número de termalizações. Em geral é sempre adequado usar um valor grande para N_{ter}. Mesmo que pareça que a partir da configuração 100 o sistema já alcançou o equilíbrio, então podemos usar de 10-100 vezes esse valor para o número de termalizações, naturalmente esse valor vai depender da precisão desejada nas simulações e do recurso computacional disponível.

Para diferentes observáveis físicos teremos diferentes parâmetros de simulação. As simulações de observáveis que envolvem funções de correlação fermiônicas são mais complicadas, a convergência é mais lenta. Nesse caso, devemos usar um valor para o número de termalizações que seja no mínimo maior ou igual àquele utilizado para o cálculo da plaqueta. De fato, em simulações mais caras computacionalmente, dificilmente teremos acesso às altas quantidades de medidas que são necessárias para estimar todos os parâmetros de simulações. Por isso é conveniente fazer uma simulação simples como a do valor esperado de plaquetas em que podemos obter facilmente muitas medidas para determinar todos os parâmetros de simulações e então fazer estimativas mais seguras para os parâmetros de outras simulações, e sempre ter em mente que cada simulação possui suas peculiaridades.

[‡‡] A equilibração ocorre em qualquer simulação, mas no caso do algoritmo de Metropolis fica mais nítido de ver, devido ao tempo maior que o sistema leva para equilibrar.

Uma vez determinado o número de termalizações, podemos começar a fazer as medidas. Contudo, ao fazer uma atualização dos campos de gauge na rede, a nova medida será muito parecida com a anterior. Assim, não será conveniente realizarmos medidas consecutivas porque elas são altamente correlacionadas. Não teremos nova informação e o método de Monte Carlo não será eficiente se utilizarmos medidas correlacionadas. Assim, o número de correlação N_{cor} é um parâmetro de simulação que nos diz a quantidade de configurações de gauge que devemos descartar entre medidas. Para o caso do número de correlação, é conveniente escolhermos um valor que não seja muito pequeno e nem muito grande. Porque queremos configurações descorrelacionadas, então N_{cor} deve ser grande o suficiente. Por outro lado, queremos varrer os mais diferentes tipos possíveis de configurações, assim, se escolhermos um valor muito grande para N_{cor}, as configurações estarão muito longe umas das outras e não teremos como saber o quão parecidas ou diferentes elas são. Assim, é sempre adequado escolher N_{cor} não muito grande para que as configurações usadas nas medidas sofram uma evolução contínua.

6.6.2 Autocorrelação

Consideremos um número de observáveis primários, enumerados por um índice grego α, com os valores médios estatísticos A_α. O objeto a ser estimado é uma função desses observáveis

$$F \equiv f(A_1, A_2, \ldots) \equiv f(A_\alpha)\,. \tag{6.39}$$

No caso do observável operador plaqueta, ele é um observável primário. Assim, o objeto estimado é $F = A_1$. Contudo, como veremos mais adiante quando trabalharmos com funções de correlação fermiônicas, o objeto F será da forma A_1/A_2.

Para o cálculo de Monte Carlo utilizamos medidas do observável primário dadas por a_α^n. Para cada observável existem $n = 1, \ldots, N_{\text{cf}}$ estimativas sucessivas, separadas pela execução de algum procedimento de atualização válido, como o algoritmo de pseudo banho térmico. Devemos supor que as medidas foram feitas no equilíbrio. Podemos fazer uma verificação visual para determinar o tempo de equilibração e depois deveremos conferir se esse valor é muito maior que o tempo de autocorrelação que será determinado pela análise dos dados (supostos no equilíbrio).[12,27]

Uma grandeza essencial para a estimativa de erros estatísticos é a função de autocorrelação, definida por

$$\Gamma_{\alpha\beta}(t) \equiv \langle (a_\alpha^n - A_\alpha)(a_\beta^{n+t} - A_\beta)\rangle = \frac{1}{N_{\text{cf}} - t} \sum_{n=1}^{N_{\text{cf}}-t} (a_\alpha^n a_\beta^{n+t}) - A_\alpha A_\beta\,, \tag{6.40}$$

que correlaciona o desvio da n-ésima estimativa de A_α com o desvio da variável β após a realização de $t > 0$ atualizações.

Numa situação típica, a função de autocorrelação normalizada exibe um comportamento exponencial assintótico para t grande

$$\bar{\Gamma}_{\alpha\beta}(t) = \frac{\Gamma_{\alpha\beta}(t)}{\Gamma_{\alpha\beta}(0)} \sim \exp\left(-\frac{t}{\tau_{\alpha\beta,\mathrm{exp}}}\right) , \tag{6.41}$$

e chamamos $\tau_{\alpha\beta,\mathrm{exp}}$ de *tempo de autocorrelação exponencial* entre os observáveis de índices α e β. A função de autocorrelação fornece informação do quão correlacionadas estão as medidas subsequentes. Para indíces α e β diferentes teremos tempos de autocorrelação diferentes. O tempo de autocorrelação exponencial τ_{exp} do observável F (6.39) é o valor supremo dos $\tau_{\alpha\beta,\mathrm{exp}}$ possíveis valores

$$\tau_{\mathrm{exp}} = \sup_{\alpha\beta} \left(\tau_{\alpha\beta,\mathrm{exp}}\right) . \tag{6.42}$$

Autocorrelações levam a erros sistemáticos que possuem o comportamento $\mathcal{O}[\exp(-t/\tau_{\mathrm{exp}})]$ se o tempo computacional entre medidas subsequentes for t. Geralmente esses erros sistemáticos são consideravelmente menores do que o erro intrínseco ao método de Monte Carlo (6.7), exceto no caso em que os dados são fortemente correlacionados.

Além do tempo de autocorrelação exponencial, também podemos definir o *tempo de autocorrelação integrado* do observável F, isto é,

$$\tau_{\mathrm{int},F} \equiv \frac{1}{2\upsilon_F} \sum_{t=-\infty}^{+\infty} \sum_{\alpha\beta} \frac{\partial F}{\partial A_\alpha} \frac{\partial F}{\partial A_\beta} \Gamma_{\alpha\beta}(t) , \tag{6.43}$$

onde

$$\upsilon_F = \sum_{\alpha\beta} \frac{\partial F}{\partial A_\alpha} \frac{\partial F}{\partial A_\beta} \Gamma_{\alpha\beta}(0) \tag{6.44}$$

está relacionado com a variância de F para dados não correlacionados, a saber, pela expressão

$$\mathrm{var}_F^{\mathrm{unc}} = \frac{1}{N_{\mathrm{cf}}} \upsilon_F . \tag{6.45}$$

O tempo de autocorrelação integrado controla o erro estatístico em medidas de Monte Carlo do observável F. Mais precisamente, sua variância pode ser escrita como

$$\mathrm{var}_F^{\mathrm{cor}} = 2\tau_{\mathrm{int},F} \mathrm{var}_F^{\mathrm{unc}} . \tag{6.46}$$

Existem duas situações extremas para o tempo de autocorrelação integrado que será instrutivo analisar. Na ausência de autocorrelações, $\Gamma_{\alpha\beta}(t) \propto \delta_{t0}$, $2\tau_{\mathrm{int},F} = 1$ e (6.46) é a variância padrão (6.45). Para o comportamento puramente exponencial, $\Gamma_{\alpha\beta}(t) \propto \exp(-|t|/\tau)$, o tempo de autocorrelação integrado pode ser escrito por

$$\tau_{\mathrm{int},F} = \frac{1}{2} \sum_{t=-\infty}^{+\infty} e^{-|t|/\tau} = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-|t|/\tau} dt + \mathcal{O}(\tau^{-1}) = \tau + \mathcal{O}(\tau^{-1}) . \tag{6.47}$$

Assim, $\tau_{\text{int},F} \approx \tau$ se $\tau \gg 1$ e a escala é recuperada. Contudo, geralmente existem muitas contribuições e $\tau_{\text{int},F}$ se comporta mais como uma "susceptibilidade dinâmica". Outra interpretação de (6.46) é que apenas o número reduzido $N_{\text{cf}}/(2\tau_{\text{int},F})$ de medidas são efetivamente independentes, o que pode ser usado para reduzir os erros estatísticos. De fato, uma vez que devemos gastar mais recurso computacional para realizar medidas correlacionadas e elas introduzem erros estatísticos nas estimativas de observáveis físicos, então é conveniente apenas usar dados independentes no método de Monte Carlo para aumentar sua eficiência.

Normalmente são necessários, no mínimo, $1000\,\tau$ valores de dados para estimar o próprio τ. O observável plaqueta é simples o suficiente para ser possível obter um conjunto grande de dados, contudo, este não é o caso para outros observáveis como aqueles associados com funções de correlação fermiônicas. Nesse sentido, existem certas técnicas propostas para análise de dados quando se tem uma amostragem pequena de dados. Assim, neste trabalho faremos uso apenas das técnicas adequadas para pequenos conjuntos de dados. Claramente, elas também são úteis caso se disponha de muitos dados para análise.

6.6.3 Método do Bloco de Dados

Calcular o tempo de autocorrelação em simulações de Monte Carlo em QCD na rede é demasiadamente custoso. O método do bloco de dados nos permite pelo menos estimar a correlação dos dados.

Considere o observável primário A com as medidas dadas por a^n, onde $n = 1, \ldots, N_{\text{cf}}$ e valor médio $\bar{A}$. Devemos dividir os dados em sub-blocos de tamanho K, calcular os valores médios para cada sub-bloco e então considerá-los como uma nova variável $a^m_{(K)}$, onde $m = 1, \ldots, N_K$.

$$\begin{aligned} a^1_{(K)} &\equiv \frac{a^1 + a^2 + \cdots a^K}{K} \\ a^2_{(K)} &\equiv \frac{a^{K+1} + a^{K+2} + \cdots a^{2K}}{K} \\ &\vdots \end{aligned} \tag{6.48}$$

A variância de cada bloco pode ser escrita como

$$\text{var}_A^{(K)} = \frac{1}{N_K - 1} \sum_{m=1}^{N_K} \left[a^m_{(K)} - \bar{A} \right]^2 . \tag{6.49}$$

Se os dados originais forem independentes, então as variâncias dos blocos deveriam decair com $1/K$. Assim, podemos calcular a variância para diferentes tamanhos de blocos e procurar a partir de qual valor de K o comportamento de $1/K$ começa. Neste caso, teremos que a partir desse valor os dados dos blocos são estatisticamente independentes. Se fizermos uma simulação sem descartar nenhuma configuração entre as atualizações,

então o valor de K encontrado corresponde ao valor do número de correlação N_{cor} para o observável A.

Para ilustrar o método do bloco de dados aplicado aos resultados obtidos para o operador plaqueta, será mostrado inicialmente um gráfico contendo apenas a curva da variância para os diferentes procedimentos utilizados para construir as configurações de gauge (Figura 12).

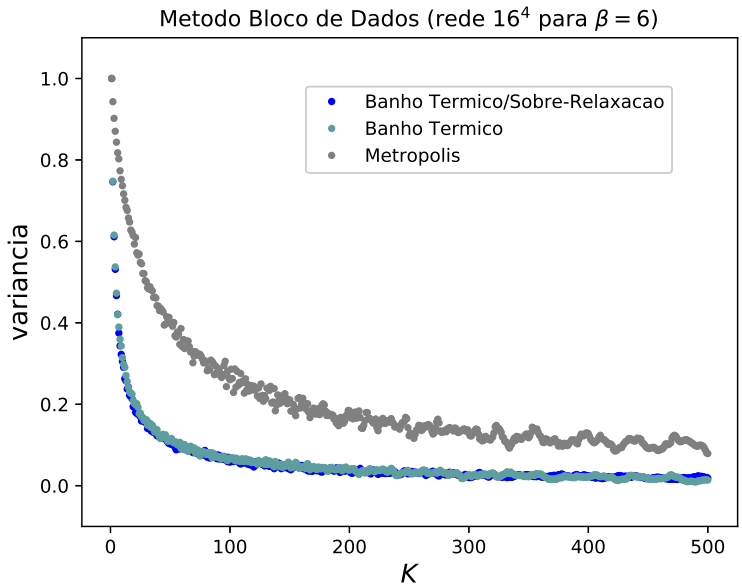

Figura 12 – Variância para o operador plaqueta. Resultado obtido para 9000 configurações consecutivas no equilíbrio.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Este gráfico deixa bastante evidente que os procedimentos de pseudo banho térmico com ou sem a etapa de sobre-relaxação tiveram resultados muito similares. O procedimento de Metropolis possui uma curva com mais flutuações estatísticas e com uma variância maior, sendo essa mais uma desvantagem dele em relação ao pseudo banho térmico.

Para determinar o número de correlação para os diferentes procedimentos é necessário realizar diferentes ajustes dos dados usando uma função $f = a + b/K$, onde a e b são constantes e $a \approx 0$. O valor de K a partir do qual o ajuste se tornar "bom" será o número de correlação para o observável operador plaqueta. Contudo, o critério para determinar se o ajuste é suficientemente bom não é exatamente preciso e deverá ser feito "a olho". Naturalmente isto deve ser o suficiente para uma simples estimativa.

Como ambos os procedimentos de pseudo banho térmico tiveram resultados similares, então a seguir somente serão descritos os gráficos com o ajuste para a determinação do número de correlação para o procedimento de Metropolis (Figura 13) e pseudo banho térmico com a etapa de sobre-relaxação (Figura 14).

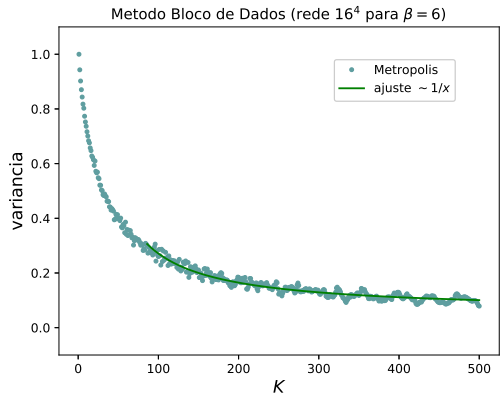

Figura 13 – Ajuste para a variância do operador plaqueta, para o procedimento de Metropolis. Número de correlação $N_{\text{cor}} = 85$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

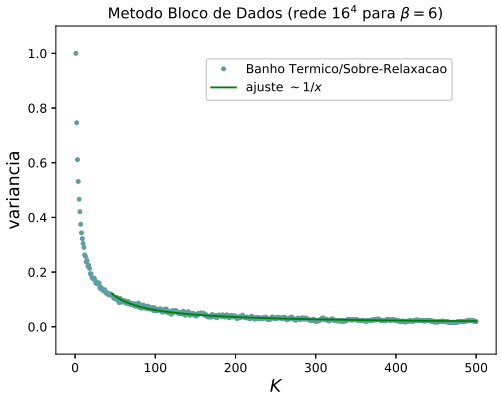

Figura 14 – Ajuste para a variância do operador plaqueta, para o procedimento de pseudo banho térmico (com ou sem sobre-relaxação). Número de correlação $N_{\text{cor}} = 45$.

Fonte: Elaborada pelo autor.

O procedimento de pseudo banho térmico é capaz de construir configurações menos correlacionadas, sendo que o número de configurações que precisamos descartar entre medidas é cerca da metade comparado ao procedimento de Metropolis. Deste modo, finalizamos a discussão sobre os algoritmos para a construção de configurações de gauge. Como é de se esperar, quando estivermos trabalhando com funções de correlação fermiônicas usaremos apenas o procedimento de pseudo banho térmico para construir as configurações, e será escolhido realizar a etapa de sobre-relaxação também.

6.6.4 Jackknife

O método de jackknife nos permite estimar os erros estatísticos quando o método de Monte Carlo é aplicado a uma amostra de dados não correlacionados. Para estimar o número de correlação de algum observável podemos usar o método de bloco de dados descrito acima. No caso de algum observável complicado para o qual não tenhamos dados suficientes para fazer uma análise confiável, é adequado ter uma estimativa do número de correlação de algum observável mais simples como o operador plaqueta e escolher um valor que seja suficientemente maior que este, por exemplo, por um fator 2-10.

Considere o observável primário A com as medidas dadas por a^n, onde $n = 1, \ldots, N_{\text{cf}}$, e valor médio $\bar{A}$. Uma amostra de jackknife é obtida omitindo-se uma medida do conjunto de medidas completo. Por exemplo, se a i-ésima medida é omitida, a correspondente amostra de jackknife consiste das medidas

$$a^1, \ldots, a^{i-1}, a^{i+1}, \ldots, a^{N_{\text{cf}}} . \tag{6.50}$$

Assim, existem $N_{\rm cf}$ amostras de jackknife $A_i^{(J)}$ diferentes com $N_{\rm cf}-1$ medidas cada, que podemos rotular com o índice i correspondendo ao número da medida omitida. Para cada amostra $A_i^{(J)}$ calculamos o valor médio A_i. Então a variância é definida por

$$\sigma_A^2 \equiv \frac{N_{\rm cf}-1}{N_{\rm cf}} \sum_{i=1}^{N_{\rm cf}} \left(A_i - \bar{A}\right)^2 . \tag{6.51}$$

A raiz quadrada da variância fornece uma estimativa para o desvio padrão de A. Para o resultado final podemos usar $\langle A \rangle = \bar{A} \pm \sigma_A$ ou substituir o valor de $\bar{A}$ por uma estimativa imparcial. A medida da parcialidade do resultado é escrita como

$$\tilde{A} \equiv \frac{1}{N_{\rm cf}} \sum_{i=1}^{N_{\rm cf}} A_i \, . \tag{6.52}$$

A estimativa imparcial é dada por $A_{\rm imparcial} = \bar{A} - (N_{\rm cf}-1)\left(\tilde{A} - \bar{A}\right)$.

O procedimento de jackknife que descrevemos serve para estimar o valor esperado de um observável primário e seu respectivo desvio. Contudo, outros observáveis físicos não são em geral primários, como a massa efetiva[§§] de uma partícula, que é obtida a partir de um ajuste exponencial do correlator (ou ajuste linear do logaritmo da razão entre correlatores). Uma simples medida do correlator possui uma flutuação grande e, portanto, não é confiável um ajuste de uma única medida. Assim, devemos realizar uma média de muitas medidas do correlator antes de fazer o ajuste. Deste modo, temos apenas uma medida confiável do correlator que é a média de todas as medidas de uma amostra. No entanto, para estimar o erro estatístico precisamos de muitas medidas confiáveis, portanto, pode parecer a priori que precisaremos calcular muitas amostras de medidas do correlator para se ter uma quantidade suficiente de medidas confiáveis do correlator para estimar o erro estatístico. O método de jackknife nesse sentido é consideravelmente importante, pois ele permite construirmos várias amostras de jackknife a partir de uma única amostra que temos disponível e, assim, podemos estimar o erro estatístico para observáveis físicos mais complicados com muito menos esforço computacional.

Neste trabalho apenas usaremos o método de jackknife para estimar os erros estatísticos, contudo, também existe outro método bastante conhecido denominado "statistical bootstrap" que poderia ser empregado. Uma descrição deste último método pode ser vista por exemplo em.[18] Ambos os métodos possuem resultados similares e também podem ser empregados juntos.

Agora finalizamos a seção análise de dados e a seguir atacaremos nossa principal aplicação, a saber, o cálculo do espectro de hádrons.

§§ Este tópico será descrito quando calcularmos observáveis físicos que dependem de funções de correlação fermiônicas.

7 ESPECTROSCOPIA DE HÁDRONS

Os observáveis físicos mais simples possíveis envolvendo férmions na rede que podemos calcular são as massas de hádrons.[12] Uma vez que existem muitas combinações de números quânticos tais como carga, spin, paridade, conteúdo de sabor etc., existe uma riqueza de possibilidades de hádrons.

O primeiro passo para calcular a massa de hádrons é construir o estado ligado com os números quânticos da partícula de interesse. A este objeto se dá o nome de interpolador. Para uma partícula é possível construir diversos interpoladores. Contudo, os sinais desses interpoladores podem ser consideravelmente diferentes, sendo alguns mais indicados para calcular a massa do estado fundamental e outros a massa de estados excitados.

Para o cálculo de massa é necessário um interpolador que construa o estado de uma partícula a partir do vácuo e outro interpolador que aniquile o estado daquela partícula em um certo ponto do espaço-tempo. Um dos interpoladores deve ser projetado para um momento espacial definido, uma vez que a massa da partícula deve depender do momento.

O valor esperado da combinação desses interpoladores é denominado correlator. A determinação da massa envolve o cálculo de correlatores. Esta etapa envolverá a determinação de funções de correlação fermiônicas. Para isso precisaremos inverter o operador de Dirac (5.36). Esta será a parte mais complicada nos cálculos de massa e que consumirá mais tempo de simulação. Numa rede 16^4 o cálculo do operador plaqueta para uma configuração de gauge leva décimos de segundos, no entanto, a inversão de um operador de Dirac pode levar anos! Mas felizmente não será necessário inverter o operador de Dirac completo e assim os cálculos ainda levarão horas, para se ter uma ideia da dificuldade das simulações quando se colocam quarks na rede. Foi por isso que começamos estudando uma grandeza que não envolvia férmions na rede.

Em 1981 começaram as primeiras estimativas do espectro de hádrons.[5,6] Naquela época todos os cálculos se limitavam à aproximação quenched para a construção de configurações de gauge e redes pequenas, sendo que os erros nas estimativas podiam ultrapassar 10% da massa experimental da partícula em questão. Além disso, se tinha poucos dados para se ter uma estimativa precisa da massa e dos erros estatísticos. Mas os resultados mesmo assim eram vistos com olhos de satisfação e sugeriam uma prova da validade da QCD no regime de baixas energias. Com o passar do tempo surgiram novas técnicas para melhorar o sinal dos interpoladores, se tornou possível realizar o cálculo para a QCD com férmions dinâmicos em redes consideravelmente maiores e ter acesso a uma amostra grande de dados, tudo isso devido às simulações de alto desempenho. Assim, atualmente se tem resultados de QCD na rede que concordam impressionantemente bem

com os dados experimentais.

Neste trabalho não teremos acesso a simulações de alto desempenho, portanto, estaremos limitados a apenas estimativas do espectro de hádrons. Mais precisamente, estaremos interessados em calcular a massa dos mésons píon e rho e do bárion próton. Na realidade, será necessário fixar a massa do píon, então de fato estimaremos apenas a massa das outras duas partículas.

7.1 Interpoladores

O primeiro passo em cálculos de espectroscopia de hádrons é a identificação de interpoladores de hádrons O e $\bar{O}$ que correspondem (respectivamente) aos operadores no espaço de Hilbert $\hat{O}$ e $\hat{O}^\dagger$, que aniquilam e criam o estado da partícula que queremos analisar. Um interpolador de hádrons é um funcional dos campos na rede com os números quânticos da partícula de interesse. É possível construir diversos pares de interpoladores que possuem os mesmos números quânticos da partícula de interesse. Alguns conseguem extrair um sinal melhor do estado fundamental da partícula, outros do estado excitado e pode ocorrer que o interpolador não tenha um sinal bem definido, dificultando os cálculos de massa. Para determinar o melhor interpolador a ser usado num dado cálculo é necessário realizar um teste para os diferentes interpoladores disponíveis e determinar o que melhor que se aplica aos interesses. Esta não é uma tarefa exatamente complicada, pois os diferentes interpoladores utilizam os mesmos propagadores fermiônicos no cálculo final para a determinação da massa. Assim, uma vez calculados os propagadores fermiônicos é possível calcular inúmeros observáveis físicos que dependem destes sem muita dificuldade ou custo computacional. Lembre-se, como foi dito anteriormente, de que o principal custo computacional em cálculos de espectroscopia de hádrons é a inversão do operador de Dirac, isto é, o cálculo de propagadores fermiônicos.

Neste trabalho apenas determinaremos a massa de hádrons no estado fundamental. Para isso usaremos interpoladores locais bem conhecidos que possuem um bom sinal do estado fundamental. Além disso, não iremos nos preocupar com a construção dos interpoladores, e apenas descreveremos os interpoladores adequados que usaremos na determinação do espectro de hádrons.

A forma geral para um interpolador local* de méson é escrita como

$$O_M(n) = \bar{\psi}^{(f_1)}(n)\Gamma\psi^{(f_2)}(n)\,, \tag{7.1}$$

onde Γ é um monômio de matrizes gama e f_i é o índice de sabor.

* Um interpolador local é construído por campos localizados em um certo ponto do espaço-tempo. Contudo, também existem interpoladores estendidos, que envolvem campos numa pequena região do espaço-tempo.

Neste trabalho também nos limitaremos a dois sabores de quarks degenerados, assim, podemos identificar $f_1 = u$ e $f_2 = d$. Na prática, inicialmente se consideram os dois sabores diferentes nos cálculos para a determinação da grandeza envolvida no cálculo de massa, mas ao final dessa etapa aparecerão propagadores para o quark u e o quark d. Já que eles são degenerados, i.e. possuem a mesma massa, temos de (5.53c) que os propagadores de ambos os sabores são idênticos e precisaremos apenas inverter um operador de Dirac. Uma vez que os valores experimentais das massas dos quarks up e down são muito próximos, esta é uma aproximação muito comum em QCD na rede, que permite economizar bastante tempo de simulação. De fato, para um cálculo mais preciso também se deveriam considerar as correções de massa devido à interação eletrofraca.

O interpolador $O_M(n)$ corresponde ao interpolador que aniquila o estado do méson de interesse no ponto n do espaço-tempo. Mas ainda precisamos conhecer o interpolador $\bar{O}_M(m)$ que será responsável pela criação do estado do méson de interesse no ponto m do espaço-tempo. Neste caso, precisamos determinar $O_M^\dagger(m)$, isto é,

$$\left[\bar{\psi}^{(f_1)}\Gamma\psi^{(f_2)}\right]^\dagger = -\psi^{(f_2)\dagger}\Gamma^\dagger\bar{\psi}^{(f_1)\dagger} = -\bar{\psi}^{(f_2)}\gamma_4\Gamma^\dagger\gamma_4\psi^{(f_1)\dagger} = \pm - \bar{\psi}^{(f_2)}\Gamma\psi^{(f_1)}\,. \tag{7.2}$$

O sinal do primeiro passo é devido a uma troca de variáveis de Grassmann. No segundo passo foi usada a relação $\bar{\psi} = \psi^\dagger\gamma_4$. E no último passo usou-se a simples propriedade[†] $\gamma_4\Gamma^\dagger\gamma_4 = \pm\Gamma$.

Como será visto na Seção 7.2, para calcular a massa de hádrons precisamos determinar o valor esperado da combinação de interpoladores O e $\bar{O}$. O resultado final será uma expressão de um decaimento exponencial com a energia. O sinal do interpolador apenas interfere no sinal da constante de proporcionalidade do decaimento. Contudo, para o cálculo de massa precisamos apenas analisar o decaimento exponencial, de modo que o sinal no último passo de (7.2) é irrelevante. Assim, podemos escrever os interpoladores de mésons como

$$O_M(n) = \bar{\psi}^{(f_1)}(n)\Gamma\psi^{(f_2)}(n) \quad , \quad \bar{O}_M(m) = \bar{\psi}^{(f_2)}(m)\Gamma\psi^{(f_1)}(m)\,. \tag{7.3}$$

Em particular, para o méson π^+ o interpolador que usaremos será

$$O_{\pi^+}(n) = \bar{d}(n)\gamma_5 u(n)\,, \tag{7.4a}$$

$$\bar{O}_{\pi^+}(m) = \bar{u}(m)\gamma_5 d(m)\,, \tag{7.4b}$$

e para o méson rho ρ^+

$$O_{\rho^+}(n)_i = \bar{d}(n)\gamma_i u(n)\,, \quad i = 1,2,3\,. \tag{7.5a}$$

$$\bar{O}_{\rho^+}(m)_i = \bar{u}(m)\gamma_i d(m)\,, \quad i = 1,2,3\,. \tag{7.5b}$$

† Essa propriedade se deve ao fato de que Γ envolve um produto de matrizes gama. Como $\gamma_i^\dagger = \gamma_i$, $\gamma_i\gamma_j = -\gamma_j\gamma_i$ para $i \neq j$ e $\gamma_i^2 = \mathbb{1}$. Aplicando essas propriedades conseguimos mostrar que $\gamma_4\Gamma^\dagger\gamma_4 = \pm\Gamma$.

O píon é um méson pseudo-escalar e rho é um méson vetorial. Desta forma existe apenas um canal para o estado do píon, enquanto existem 3 canais diferentes para o estado do rho. Para determinar a massa do rho podemos calcular a média da massa associada aos seus três canais. O interpolador para π^- e ρ^- pode ser obtido pela troca $u \leftrightarrow d$ em (7.4) e (7.5), contudo, a expressão final para o cálculo de massa é a mesma.

A forma genérica para os interpoladores de bárions deve envolver três campos de quarks, uma vez que bárions são formados por três quarks. Aqui nos limitaremos em mostrar apenas a forma geral para o interpolador de núcleon tipo-uud.

$$O_{N_\pm}(n) = \epsilon_{abc} P_\pm \Gamma^A u_a(n) \left[u_b^T(n) \Gamma^B d_c(n) \right] , \tag{7.6a}$$

$$\bar{O}_{N_\pm}(m) = \epsilon_{abc} \left[\bar{u}_a(m) \Gamma^B \bar{d}_b^T(m) \right] \bar{u}_c(m) \Gamma^A P_\pm , \tag{7.6b}$$

onde os projetores paridade $P_\pm$ são definidos por

$$P_\pm \equiv \frac{1}{2} \left(\mathbb{1} \pm \gamma_4 \right) . \tag{7.7}$$

O interpolador O_{N_+} descreve o núcleon de paridade positiva, enquanto O_{N_-} acopla ao seu parceiro de paridade negativa $N(1535)$ com uma massa de 1535 Mev.

Existem três possibilidades para as matrizes Γ^A e Γ^B, a saber, $\left(\Gamma^A, \Gamma^B\right) = (\mathbb{1}, C\gamma_5)$, (γ_5, C) ou $(\mathbb{1}, i\gamma_4 C\gamma_5)$, onde C é a matriz conjugação de carga definida por

$$C \equiv i\gamma_2\gamma_4 . \tag{7.8}$$

Para este trabalho adotaremos a primeira possibilidade $\left(\Gamma^A, \Gamma^B\right) = (\mathbb{1}, C\gamma_5)$ e calcularemos apenas a massa do próton, assim o interpolador de interesse é escrito como

$$O_{p^+}(n) = \epsilon_{abc} P_+ u_a(n) \left[u_b^T(n) C\gamma_5 d_c(n) \right] , \tag{7.9a}$$

$$\bar{O}_{p^+}(m) = \epsilon_{abc} \left[\bar{u}_a(m) C\gamma_5 \bar{d}_b^T(m) \right] \bar{u}_c(m) P_+ . \tag{7.9b}$$

7.2 Correlator

O correlator é definido como o valor esperado da combinação dos interpoladores que aniquila e cria o estado da partícula de interesse.[1]

$$c(\vec{x}, n_t) = \langle O(\vec{x}, n_t) \bar{O}(\vec{0}, 0) \rangle = \langle \Omega | \hat{O}(\vec{x}) e^{-n_t a H} \hat{O}^\dagger(\vec{0}) | \Omega \rangle , \tag{7.10}$$

onde $|\Omega\rangle$ denota o estado fundamental (vácuo físico). No segundo passo foi usado (3.7). Note que, de acordo com (3.20a), o correlator corresponde a uma função de Green sobre os campos de quarks.

Usando autovalores e autoestados do hamiltoniano com momento $\vec{p}$,

$$H|j, \vec{p}\rangle = E_j(\vec{p}) |j, \vec{p}\rangle , \quad E_j = \sqrt{m_j^2 + \vec{p}^2} , \tag{7.11}$$

aqui j se refere ao j-ésimo estado excitado de uma partícula propagando para frente ou para trás com momento $\vec{p}$. Desta forma, podemos escrever o correlator como

$$\begin{aligned} c(\vec{x}, n_t) &= \sum_j \sum_{\vec{p}\in\tilde{\Lambda}_3} \langle\Omega|\hat{O}(\vec{x})|j,\vec{p}\rangle\langle j,\vec{p}|\hat{O}^\dagger(\vec{0})|\Omega\rangle e^{-n_t a E_j(\vec{p})} \\ &= \sum_j \sum_{\vec{p}\in\tilde{\Lambda}_3} |\langle\Omega|\hat{O}(\vec{0})|j,\vec{p}\rangle|^2 e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}} e^{-n_t a E_j(\vec{p})} , \end{aligned} \tag{7.12}$$

onde no segundo passo foi usada a invariância translacional $\hat{O}(\vec{x}) = \hat{O}(\vec{0})e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}}$.

O correlator de momento $\vec{q}$ pode ser obtido pesando-se os operadores com o fator de fase $e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}}$ e somando sobre os sítios espaciais da rede

$$\begin{aligned} C(\vec{q}, n_t) &= \sum_{\vec{x}\in\Lambda_3} c(\vec{x}, n_t) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{x}} \\ &= |\Lambda_3| \sum_j |\langle\Omega|\hat{O}(\vec{0})|j,\vec{q}\rangle|^2 e^{-n_t a E_j(\vec{q})} , \end{aligned} \tag{7.13}$$

onde o fator $|\Lambda_3|$ vem da identidade $\frac{1}{|\Lambda_3|}\sum_{\vec{x}\in\Lambda_3} e^{i(\vec{p}-\vec{q})\cdot\vec{x}} = \delta(\vec{p}-\vec{q})$ usada para filtrar o termo que depende apenas do momento $\vec{q}$.

Para uma rede periódica no tempo, N_T, temos

$$C(\vec{q}, n_t) = \sum_j \left[A_j(\vec{q}) e^{-n_t a E_j(\vec{q})} + B_j(\vec{q}) e^{-(N_T - n_t) a E_j^*(\vec{q})} \right] , \tag{7.14}$$

onde

$$A_j(\vec{q}) = |\Lambda_3| |\langle\Omega|\hat{O}(\vec{0})|j,\vec{q}\rangle|^2 , \tag{7.15a}$$

$$B_j(\vec{q}) = |\Lambda_3| |\langle\Omega|\hat{O}(\vec{0})|j^*,\vec{q}\rangle|^2 . \tag{7.15b}$$

A energia $E_j(\vec{q})$ corresponde ao j-ésimo estado excitado da partícula propagando para frente com momento $\vec{q}$ e a energia $E_j^*(\vec{q})$ corresponde ao j-ésimo estado excitado da partícula propagando para trás com momento $\vec{q}$. Para tempos suficientemente longos, obtemos

$$C(\vec{q}, n_t) \sim \left[A_0(\vec{q}) e^{-n_t a E_0(\vec{q})} + B_0(\vec{q}) e^{-(N_T - n_t) a E_0^*(\vec{q})} \right] . \tag{7.16}$$

Para mésons, as partículas propagando para frente e para trás são idênticas, assim, o correlator de momento $\vec{q}$ se torna

$$C_M(\vec{q}, n_t) \sim \cosh E_0(\vec{q}) \left(\frac{N_T}{2} - n_t \right) . \tag{7.17}$$

Para bárions, a partícula propagando para trás é mais pesada que a partícula propagando para frente, assim podemos aproximar o correlator por

$$C_B(\vec{q}, n_t) \sim e^{-n_t a E_0(\vec{q})} \tag{7.18}$$

para $n_t \lesssim N_T/2$.

Para a determinação do espectro de hádrons devemos identificar o momento $\vec{q}$ como zero, de modo que calcularemos o correlator $C(\vec{0}, n_t) \equiv C(n_t)$ para extrair a massa de repouso $m_H = E_0(\vec{0})$ da partícula no estado fundamental.

Uma vez calculado o correlator $C(n_t)$, podemos realizar um ajuste da forma (7.17) para mésons ou um ajuste exponencial (7.18) para bárions para determinar a massa da partícula de interesse. Contudo, este procedimento tem a desvantagem de não ser possível identificar com clareza os pontos do correlator que possuem o comportamento do ajuste realizado. Um procedimento geralmente mais utilizado para a extração de massa é realizar um ajuste da *massa efetiva* definida por

$$m_{ef}(n_t) = \ln \frac{C(n_t)}{C(n_t+1)} \,. \tag{7.19}$$

Quando o correlator for dominado pela energia do estado fundamental, a massa efetiva se torna constante e forma um *platô de massa efetiva* em m_H. Assim, podemos identificar o platô na curva de $m_{ef}(n_t)$ e realizar um simples ajuste constante que corresponde ao valor da massa desejada.

7.2.1 Correlatores de Interesse

Deveremos calcular a massa dos mésons píon e rho e do bárion próton. Portanto, precisamos determinar o correlator

$$C(n_t) = \sum_{\vec{x}\in\Lambda_3} \langle O(\vec{x}, n_t)\bar{O}(\vec{0}, 0)\rangle \tag{7.20}$$

para os interpoladores (7.4), (7.5) e (7.9).

Inicialmente, consideramos um interpolador genérico para um méson. É conveniente primeiro resolvermos o cálculo do correlator para as variáveis de Grassmann

$$\begin{aligned}
\langle O(n)_M \bar{O}(0)_M\rangle_F &= \langle \bar{\psi}^{(f_1)}(n)_{\substack{\alpha_1\\c_1}} \Gamma_{\alpha_1\alpha_2} \psi^{(f_2)}(n)_{\substack{\alpha_2\\c_1}} \bar{\psi}^{(f_2)}(0)_{\substack{\beta_1\\c_2}} \Gamma_{\beta_1\beta_2} \psi^{(f_1)}(0)_{\substack{\beta_2\\c_2}}\rangle_F \\
&= -\Gamma_{\alpha_1\alpha_2}\Gamma_{\beta_1\beta_2} \langle \psi^{(f_2)}(n)_{\substack{\alpha_2\\c_1}} \bar{\psi}^{(f_2)}(0)_{\substack{\beta_1\\c_2}}\rangle_F \langle \psi^{(f_1)}(0)_{\substack{\beta_2\\c_2}} \bar{\psi}^{(f_1)}(n)_{\substack{\alpha_1\\c_1}}\rangle_F \\
&= -\Gamma_{\alpha_1\alpha_2}\Gamma_{\beta_1\beta_2} D^{-1}(n|0)_{\substack{\alpha_2\beta_1\\c_1c_2}} D^{-1}(0|n)_{\substack{\beta_2\alpha_1\\c_2c_1}} \\
&= -\mathrm{tr}\left[D^{-1}(n|0)\Gamma D^{-1}(0|n)\Gamma\right] \,.
\end{aligned} \tag{7.21}$$

Na segunda linha reordenamos as variáveis de Grassmann e usamos o fato de que os valores esperados se fatoram com respeito aos sabores. Na terceira linha usamos o resultado para a contração de Wick (3.51) e a aproximação de dois sabores degenerados, isto é, as massas dos quark up e down consideradas iguais, de modo que os respectivos propagadores fermiônicos são iguais.

Agora é conveniente introduzir uma simetria que o operador de Dirac possui, a saber, a *hermiticidade* γ_5[‡]

$$D^\dagger = \gamma_5 D \gamma_5 \qquad \text{ou} \qquad D^{-1\,\dagger} = \gamma_5 D^{-1} \gamma_5 \,. \tag{7.22}$$

Usando a propriedade $\gamma_5^2 = \mathbb{1}$, temos que

$$D^{-1}(0|n) = \gamma_5 D^{-1\,\dagger}(0|n)\gamma_5 \,, \tag{7.23}$$

então

$$\langle O(n)_M \bar{O}(0)_M \rangle_F = -\mathrm{tr}\left[D^{-1}(n|0)\Gamma\gamma_5 D^{-1\,\dagger}(0|n)\gamma_5\Gamma\right] \,. \tag{7.24}$$

Uma vez que $D^{-1\,\dagger}(0|n)_{\substack{\alpha\beta\\ ab}} = D^{-1}(n|0)^*_{\substack{\beta\alpha\\ ba}}$, então apenas precisaremos nos preocupar com o cálculo de um único propagador fermiônico no espectro de hádrons para o caso de dois sabores degenerados. Essa é uma vantagem da simetria de hermiticidade γ_5 do operador de Dirac que nos economiza muito esforço computacional.

O correlator mais simples é aquele do méson $\pi^\pm$, nesse caso temos $\Gamma = \gamma_5$. Lembrando que $\gamma_5^2 = \mathbb{1}$, podemos escrever

$$\langle O(n)_{\pi^\pm} \bar{O}(0)_{\pi^\pm} \rangle_F = -\sum_{\substack{\alpha,\beta\\ a,b}} \left| D^{-1}(n|0)_{\substack{\alpha\beta\\ ab}} \right|^2 \tag{7.25}$$

e então

$$C_{\pi^\pm}(n_t) = \sum_{\vec{x}\in\Lambda_3} \sum_{\substack{\alpha,\beta\\ a,b}} \left| D^{-1}(n|0)_{\substack{\alpha\beta\\ ab}} \right|^2 \,, \tag{7.26}$$

onde aqui adotaremos $n = (\vec{x}, n_t)$. O sinal em (7.25) foi descartado, já que ele é irrelevante para o decaimento do correlator (7.16). De maneira análoga podemos calcular o correlator do méson $\rho^\pm$, isto é,

$$C_{\rho^\pm}(n_t) = \sum_{\vec{x}\in\Lambda_3} \sum_{\substack{\alpha_1,\alpha_2\\ \beta_1,\beta_2\\ c_1,c_2}} D^{-1}(n|0)_{\substack{\alpha_1\beta_1\\ c_1c_2}} (\gamma_i\gamma_5)_{\beta_1\alpha_2} D^{-1}(n|0)^*_{\substack{\beta_2\alpha_2\\ c_1c_2}} (\gamma_i\gamma_5)_{\beta_2\alpha_1} \,. \tag{7.27}$$

No caso do bárion próton é necessário repetir o mesmo procedimento, mas naturalmente o cálculo se torna mais extenso já que o interpolador do próton é mais complicado. Contudo, ainda sem muitas dificuldades podemos obter uma relação para o correlator do próton como segue

$$\begin{aligned} C_{p^+}(n_t) \;=\; & \sum_{\vec{x}\in\Lambda_3} \sum_{\substack{\alpha,\alpha'\\ \beta,\beta'\\ \gamma,\gamma'}} \sum_{\substack{a,a'\\ b,b'\\ c,c'}} \epsilon_{abc}\epsilon_{a'b'c'} (C\gamma_5)_{\alpha'\beta'} (C\gamma_5)_{\alpha\beta} (P_+)_{\gamma\gamma'} D^{-1}(n|0)_{\substack{\beta'\beta\\ b'b}} \times \\ & \left(D^{-1}(n|0)_{\substack{\alpha'\alpha\\ a'a}} D^{-1}(n|0)_{\substack{\gamma'\gamma\\ c'c}} - D^{-1}(n|0)_{\substack{\alpha'\gamma\\ a'c}} D^{-1}(n|0)_{\substack{\gamma'\alpha\\ c'a}} \right) \,. \end{aligned} \tag{7.28}$$

‡ Em outras formulações para o operador de Dirac essa simetria pode se quebrar, contudo, apenas trabalharemos com férmions de Wilson.

7.3 Aproximação Quenched

Até o momento conseguimos resolver a parte fermiônica para a expressão dos correlatores de hádrons de interesse. Agora precisamos lidar com a parte de gauge.

Para entendermos de forma mais clara como atacar a parte de gauge na determinação do espectro de hádrons, consideramos o correlator simples de um méson. O cálculo do seu valor esperado pode ser dividido em duas partes: primeiro determinamos o valor esperado para as variáveis de Grassmann e em seguida inserimos este resultado em um cálculo de valor esperado para variáveis de gauge

$$\langle O_M(n)\bar{O}_M(0)\rangle = \langle\langle O_M(n)\bar{O}_M(0)\rangle_F\rangle_G \,. \tag{7.29}$$

Note que agora devemos ficar atentos ao realizarmos uma contração de Wick (3.51) sobre os campos de quarks, pois não podemos cancelar o fator determinante $\det D$ que aparece em (3.34), uma vez que o operador de Dirac depende da variável de ligação que também é uma variável de integração. Usando a equação (7.24), obtemos a seguinte expressão para o valor esperado do correlator de mésons

$$-\frac{\int D(U)\mathrm{tr}\left[D^{-1}(n|0)\Gamma\gamma_5 D^{-1\,\dagger}(0|n)\gamma_5\Gamma\right](\det D[U])^2 e^{-S_G[U]}}{\int D(U)(\det D[U])^2 e^{-S_G[U]}} \,. \tag{7.30}$$

O cálculo completo de QCD na rede para o espectro de hadróns envolve a determinação do determinante do operador de Dirac. As configurações de gauge devem ser construídas com o peso de Boltzmann dado pela ação efetiva

$$S_{ef} = S_G[U] - N \ln\det D[U] \,, \tag{7.31}$$

onde $N = 2$ para os mésons de interesse e $N = 3$ para o bárion próton. Este fator naturalmente se deve ao número do produto de propagadores para cada correlator. Agora se variarmos um campo de gauge $U_\mu(n) \to U_\mu(n)'$ em um determinado sítio n da rede, a variação da ação efetiva não depende apenas das seis plaquetas compartilhadas pela variável de ligação a ser atualizada. Devido ao determinante $\det D[U]$ que aparece em (7.31), uma simples modificação de um campo de gauge envolve o cálculo do determinante de uma matriz com $12N_tN_s^3$ linhas e colunas. A ação efetiva perde toda a localidade que aparece na ação de gauge pura. Deste modo, um cálculo completo para a QCD na rede é altamente não trivial. Geralmente a dimensão do operador de Dirac é da ordem de milhões e precisamos calcular o determinante desta matriz para cada atualização da rede, claramente é um custo proibitivamente caro.

A determinação do espectro de hádrons sempre envolve alguma aproximação do determinante do operador de Dirac. Para o caso mais simples se iguala o determinante a uma constante, $\det D[U] \approx \mathrm{const}$, esta é a assim chamada *aproximação quenched*. Nesse caso, este fator pode ser inserido na constante de normalização e a ação efetiva se torna a

própria ação de gauge pura, portanto, as configurações de gauge são construídas com o peso de Boltzmann dado pela ação de gauge pura. Todos os procedimentos aprendidos ao trabalharmos com o observável operador plaqueta na Seção 6.3 podem ser aplicados sem perda de generalidade ao cálculo do espectro de hádrons na aproximação quenched.

A interpretação física para o determinante do operador de Dirac é que ele descreve o vácuo fermiônico onde pares de quarks e antiquarks são criados e aniquilados. Esses quarks são normalmente chamados de *quarks do oceano*, já que eles estão relacionados ao cenário de Dirac de um oceano de férmions, onde os buracos denotam antiférmions. Aproximar o determinante de Dirac por uma constante corresponde a negligenciar o efeito de loops de quarks do vácuo. A aproximação quenched pode ser considerada como o limite em que os quarks do oceano se tornam infinitamente pesados e, portanto, não podem ser gerados do vácuo como pares de quarks-antiquarks.

A aproximação quenched se justifica porque se espera que o peso relativo de loops fermiônicos na QCD seja pequeno, e pelos próprios resultados já registrados. Em outras aproximações a estrutura dinâmica do vácuo de férmions deve ser considerada, essas são as assim chamadas simulações com *férmions dinâmicos*. Contudo, o seu custo computacional é consideravelmente maior. Assim, neste trabalho nos limitaremos apenas ao estudo do espectro de hádrons na aproximação quenched.

7.4 Inversão do Operador de Dirac

Para conseguirmos calcular os correlatores (7.26), (7.27) e (7.28) é necessário saber como inverter o operador de Dirac, isto é, determinar $D^{-1}(n|0)_{\substack{\alpha\beta\\ ab}}$. O operador de Dirac é uma matriz esparsa, com muitas entradas nulas. Contudo, este não é o caso para o propagador fermiônico. Cada entrada de $D^{-1}(n|0)_{\substack{\alpha\beta\\ ab}}$ conecta uma fonte pontual $(0, \beta, b)$ com um sorvedouro pontual (n, α, a). O índice do espaço-tempo da fonte é sempre fixado em 0. Deste modo, precisamos determinar apenas doze colunas do propagador fermiônico para os diferentes pares (β, b). Em simulações típicas a dimensão do operador de Dirac é da ordem de milhões, assim, uma tentativa de sua inversão completa levaria muito tempo e precisaria de uma quantidade muito alta de memória computacional. Portanto, precisamos de algoritmos que sejam capazes de inverter apenas determinadas colunas de matrizes esparsas. Além disso, a matriz do operador de Dirac não é positiva definida, portanto, precisamos de algoritmos que também consigam lidar com matrizes não positivas definidas.

A inversão do operador de Dirac para uma determinada fonte se resume em resolver um sistema linear. Para ver isso, podemos inicialmente escrever

$$\sum_{n\in\Lambda}\sum_{\alpha,a} D(n'|n)_{\substack{\alpha'\alpha\\ a'a}} D^{-1}(n|0)_{\substack{\alpha\beta\\ ab}} = \delta_{n',0}\delta_{\alpha'\beta}\delta_{a'b}\,. \tag{7.32}$$

Se fixarmos o par (β, b) para uma determinada fonte, obtemos o seguinte sistema linear

$$Ax = b\,, \tag{7.33}$$

onde A é a matriz do operador de Dirac $D(n'|n)_{\substack{\alpha'\alpha\\ a'a}}$, x é o vetor de uma coluna do propagador $D^{-1}(n|0)_{\substack{\alpha\beta\\ ab}}\big|_{(\beta,b)\,\text{fixado}}$ e b é o vetor de uma coluna da identidade $\delta_{n',0}\delta_{\alpha'\beta}\delta_{a'b}\big|_{(\beta,b)\,\text{fixado}}$. Assim, para determinar as doze colunas de interesse do propagador fermiônico precisamos calcular x para os doze sistemas lineares (7.33) de combinações de pares (β, b).

Existem muitos algoritmos disponíveis que são capazes de resolver (7.33) para o operador de Dirac. Neste trabalho usaremos o algoritmo *Gradiente Biconjugado Estabilizado* (Bi-CGStab).[28] Sua escolha é devida à fácil implementação e eficiência.[29] No livro de referência de R. Barrett et al.[30] podem ser encontrados diferentes métodos para resolver sistemas lineares e também modelos dos algoritmos, incluindo o Bi-CGStab, para ajudar em sua implementação. A seguir apenas mostraremos um modelo para o algoritmo Bi-CGStab.

Algoritmo 1: Pseudo código para o algoritmo Bi-CGStab.

Tente uma solução inicial para $x^{(0)}$
$r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$
$\tilde{r} = r^{(0)}$ (por exemplo)
for $i = 1, 2, \ldots$ **do**
  $\rho_{i-1} = \tilde{r}^\dagger \cdot r^{(i-1)}$
  if $\rho_{i-1} = 0$ **then**
    método falha.
  if $i = 1$ **then**
    $p^{(1)} = r^{(0)}$
  else
    $\beta_{i-1} = \alpha_{i-1}\rho_{i-1}/(\omega_{i-1}\rho_{i-2})$
    $p^{(i)} = r^{(i-1)} + \beta_{i-1}\left(p^{(i-1)} - \omega_{i-1}v^{(i-1)}\right)$
  $v^{(i)} = Ap^{(i)}$
  $\alpha_i = \rho_{i-1}/\left(\tilde{r}^\dagger \cdot v^{(i)}\right)$
  $s = r^{(i-1)} - \alpha_i v^{(i)}$
  if *se a norma de s é pequena o suficiente* **then**
    $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$
    stop
  $t = As$
  $\omega_i = t^\dagger \cdot s/(t^\dagger \cdot t)$
  $r^{(i)} = s - \omega_i t$
  $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i\, p^{(i)} + \omega_i s$
  repita até convergência ...

7.5 Discussão de Simulação

O valor da massa de um hádron é invariante se multiplicarmos seu correlator por uma constante. Um fator constante não altera a forma do decaimento em (7.16). De maneira análoga, o valor da massa de um hádron também é invariante se multiplicarmos o operador de Dirac por uma constante. Assim, é conveniente nas simulações numéricas escrever o operador de Dirac para férmions de Wilson [ver (5.39)] como[1]

$$D(n|m)_{\substack{\alpha\beta\\ ab}} = \delta_{\alpha\beta}\delta_{ab}\delta_{n,m} - \kappa \sum_{\mu=\pm 1}^{\pm 4} (1-\gamma_\mu)_{\alpha\beta} U_\mu(n)_{ab}\delta_{n+\hat{\mu},m}\,, \tag{7.34}$$

onde o parâmetro κ está relacionado com a massa m_q do quark por

$$m_q a = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{\kappa} - \frac{1}{\kappa_c}\right)\,. \tag{7.35}$$

Para determinar o valor de κ_c devemos calcular a massa do píon $m_{\pi^\pm}$ para diferentes valores de κ e encontrar o ponto onde $m_{\pi^\pm}$ se anula, porque a simetria quiral diz que a própria massa do quark deve se anular nesse ponto. Contudo, a determinação desse ponto não é obtida diretamente dos resultados das simulações numéricas, mas deve envolver a extrapolação desses dados.

7.5.1 Extrapolação de Dados

Como veremos mais adiante, a inversão do operador de Dirac é sensível ao valor da massa do quark. E acontece que quanto mais próximo κ está de κ_c, mais instável e lenta se torna a inversão do operador de Dirac. Em simulações numéricas não é possível alcançar o limite quiral. Assim, devemos determinar κ_c a partir da extrapolação dos dados.

A extrapolação dos dados pode ser feita com a ajuda da teoria de pertubação quiral para aproximação quenched da QCD.[31] A massa do píon pode ser expandida em termos de $m_u + m_d$ ou simplesmente m_q, uma vez que estamos considerando os sabores u e d degenerados. A forma da massa do píon pode ser escrita como[§]

$$\begin{aligned} m_{\pi^\pm}^2 &= A m_q + \mathcal{O}(m_q^2) \\ m_{\pi^\pm}^2 &\approx B\left(\frac{1}{\kappa} - \frac{1}{\kappa_c}\right)\,. \end{aligned} \tag{7.36}$$

Assim, devemos calcular a massa do píon para diferentes valores de κ e depois realizar um ajuste da forma (7.36) para encontrar o ponto onde a massa do píon se anula e determinar o valor de κ_c.

O valor experimental da massa do quark m_q está bem próximo do limite quiral. Deste modo, sempre precisamos fazer extrapolações de dados para o limite quiral a fim

§ Nesta expressão, e nas análogas para o rho e próton, não utilizamos os termos logarítmicos, por simplicidade e conveniência.

de determinar o valor experimental do espectro de hádrons em simulações de QCD na rede. Assim, também precisaremos de alguma expressão para a massa do méson rho e do bárion próton para conseguir extrapolar os dados. Nesse caso, tanto a massa do rho como do próton pode ser escrita em termos da massa do píon.[32,33] A forma da massa do rho e do próton pode ser escrita pela mesma expressão

$$m(m_{\pi^\pm}) = m_0 + \delta C m_{\pi^\pm} + D m_{\pi^\pm}^2 + E m_{\pi^\pm}^3 + \mathcal{O}(m_{\pi^\pm}^4)\,. \tag{7.37}$$

O termo linear em $m_{\pi^\pm}$ é proporcional ao parâmetro δ e representa uma particularidade da aproximação quenched. Sua magnitude é da ordem $\delta \approx 0.1$, entretanto, não existe uma determinação precisa. Se δ assumir um valor considerável, então os resultados da aproximação quenched não são confiáveis. Contudo, evidências numéricas sugerem que o termo linear é pequeno, assim, a exposição do fator δ serve apenas para lembrar que a aproximação quenched possui problemas. Uma vez que esse termo é pequeno, ele será desconsiderado nos ajustes para a extrapolação de dados.

7.5.2 Determinação de Massa

Como foi discutido na Seção 7.2, podemos determinar a massa de hádrons a partir de um ajuste sobre o correlator de interesse ou um ajuste sobre sua respectiva massa efetiva (7.19). A fim de ilustrar isso será mostrado parte do resultado obtido para o méson píon. As simulações foram realizadas para alguns valores de κ em uma rede de tamanho $16^3 \times 32$ e $\beta = 6$.

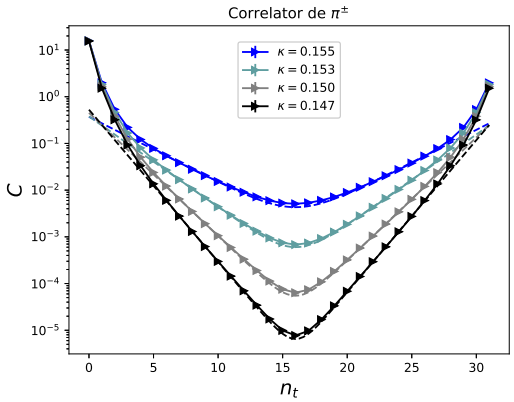

Figura 15 – Ajuste do correlator para o píon.

Fonte: Elaborada pelo autor.

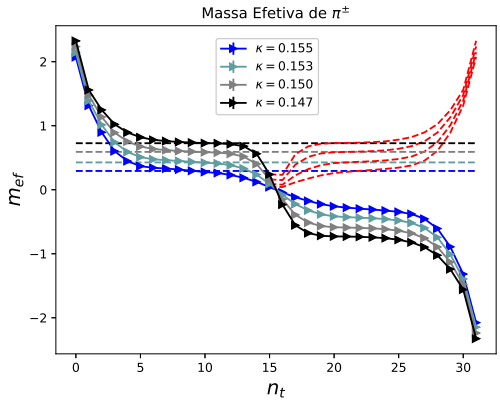

Figura 16 – Ajuste da massa efetiva para o píon.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Como já visto, o correlator do píon pode ser ajustado pela expressão (7.17). Contudo, não sabemos exatamente os pontos do correlator que devemos usar para realizar o ajuste (Figura 15), além de precisarmos utilizar uma expressão consideravelmente mais complicada em seu ajuste. Assim, é mais comum em simulações numéricas trabalhar apenas com o

ajuste da massa efetiva, pois ela apresenta um platô na região da massa em que estamos interessados e podemos realizar um ajuste por uma simples expressão constante. Deste modo, devemos trabalhar apenas com o ajuste da massa efetiva para a determinação do espectro de hádrons.

O gráfico da massa efetiva (Figura 16) para mésons exibe um comportamento espelhado. O valor da parte esquerda do gráfico representa uma partícula propagando para frente e o valor da parte direita representa uma partícula propagando para trás. Como ambas as partículas são idênticas para mésons, os valores da massa efetiva devem ser iguais em módulo para ambas as partículas. Para o caso do bárion próton o valor da massa efetiva da parte direita do gráfico deve ser maior, já que a partícula propagando para trás é mais pesada no caso de bárions. Normalmente os dados da parte direita do gráfico de massa efetiva de hádrons possuem mais erros estatísticos[¶] e, portanto, é comum apenas realizar um ajuste para $n_t \leq N_t/2$ da massa efetiva para a determinação da massa do estado fundamental de hádrons.

A partir de ajustes de massas efetivas conseguimos determinar o valor da massa de hádrons em unidades da rede ($m_{\text{fisica}}a$) para diferentes valores do parâmetro κ. Realizando uma extrapolação quiral como descrito na Seção 7.5.1, podemos determinar o valor de κ_c em (7.35) e calcular o valor da massa de hádrons em unidades da rede em função da massa do quark em unidades da rede. Como se pode notar, até o momento somos capazes apenas de determinar massas em unidades da rede. Existem diversos procedimentos que podem ser realizados para calcular o valor do espaçamento da rede a fim de converter em unidades físicas os resultados das massas determinadas, isto é,

$$m_{\text{fisica}} = m_{\text{rede}} a^{-1} \,. \tag{7.38}$$

Neste trabalho não nos preocuparemos com essa questão, mas apenas usaremos o valor de a já calculado.[34] Para uma rede com $\beta = 6$, constante de acoplamento inverso usada nas simulações deste trabalho, o valor do inverso do espaçamento da rede é $a^{-1} \approx 1850$ MeV.

Neste momento somos capazes de calcular a massa de hádrons em função da massa de quarks tudo em unidades físicas, contudo, ainda falta apenas mais uma coisa para determinarmos o espectro de hádrons, a saber, fixar a massa de alguma partícula. Neste caso, poderíamos por exemplo considerar a massa do quark degenerado como a média da massa do quark up e quark down, assim, deveríamos encontrar a massa dos hádrons para esse valor da massa do quark e considerar como a estimativa da massa experimental. No entanto, o procedimento mais comum é fixar a massa do píon, isto é, $m_{\pi^\pm} = 140$ MeV, e determinar o valor da massa do quark degenerado e a massa dos hádrons neste ponto, que será a estimativa para a massa experimental.

¶ A massa efetiva do píon é bastante comportada, contudo, para partículas mais pesadas se tornam mais evidentes os erros.

A determinação do espectro de hádrons sempre envolve a fixação do valor da massa de um certo hádron a fim de determinar o valor de outros hádrons de interesse. Se além de dois sabores degenerados também estivéssemos considerando o sabor strange, neste caso precisaríamos fixar a massa de mais um hádron, naturalmente um hádron composto pelo quark s. Assim, determinaríamos o valor do quark strange e usaríamos esse valor para encontrar a massa experimental de outros hádrons compostos pelo quark s.

7.5.3 Determinação de Erros

Nas simulações realizadas para determinar o espectro de hádrons foi utilizado um número de correlação suficientemente grande, a saber, $N_{\text{cor}} = 250$, para considerar que as configurações de gauge amostradas para o cálculo de massa não são correlacionadas. A determinação precisa de N_{cor} para o observável massa teria um custo computacional extremamente alto, então é conveniente apenas utilizar um valor suficientemente alto para o número de correlação que nos assegure que as amostras de dados não estão correlacionadas. Neste caso, podemos utilizar o método jackknife visto na Seção 6.6.4 para estimar os erros estatísticos para os valores de massa efetiva.

A determinação do espectro de hádrons, contudo, não envolve o uso direto dos valores de massa efetiva, mas o valor obtido pelo seu ajuste na região que forma um platô. Mais precisamente, faremos um ajuste da massa efetiva para diferentes valores de κ e depois realizaremos uma extrapolação quiral sobre esses dados por meio de outro ajuste. Desta forma, precisamos de algum método que seja capaz de determinar os parâmetros e uma estimativa do seu erro para um ajuste de dados que possuem erros. Neste trabalho usaremos o programa python junto com o pacote matplotlib para gerar gráficos e o pacote scipy.optimize.curve_fit para realizar os ajustes de interesse por meio do método dos *mínimos quadrados não linear*.[35,36]

No primeiro ajuste teremos os dados da massa efetiva com seus erros estimados pelo método jackknife. No segundo ajuste teremos diferentes valores de massa em função da variável κ com seus erros estimados pelo próprio ajuste constante da massa efetiva. Após esse ajuste será possível obter os parâmetros e seus erros da função (7.36), que descreve a massa do píon em termos de κ, e naturalmente também dos parâmetros e seus erros da função (7.37), que descreve a massa do rho e do próton em termos da massa do píon. A partir desses parâmetros podemos calcular o valor absoluto da diferença máxima entre o valor de uma determinada massa e seus valores possíveis considerando os desvios associados aos seus parâmetros. Este valor corresponde a uma estimativa para o erro da massa em questão.

Neste trabalho apenas realizaremos estimativas para o espectro de hádrons, contudo, podemos ter uma noção da complexidade envolvida em cálculos de alta precisão. Em particular, também deveríamos nos preocupar com erros devido a tamanho finito, como o

volume e o espaçamento da rede.

7.6 Resultados

Para a determinação do espectro de hádrons foram construídas $N_{\text{cf}} = 50$ configurações de gauge para uma rede de tamanho $16^3 \times 32$ e $\beta = 6$. As configurações de gauge foram construídas a partir do procedimento pseudo banho térmico com sobre-relaxação (Seção 6.3). As $N_{\text{ter}} = 10000$ configurações iniciais foram descartadas e foi usado o valor $N_{\text{cor}} = 250$ para o número de correlação. A reunitarização dos campos de gauge foi realizada a cada $N_{\text{unit}} = 500$ configurações. A simulação inteira para construir as 50 configurações de gauge levou 25 horas, sendo que 12 horas foi o tempo gasto para a etapa de termalização. O tempo médio para cada atualização da rede foi 4 segundos. Cada uma das 50 configurações de gauge foi salva num arquivo de dados. O tamanho total dos arquivos foi 13 GB. Em seguida, todas as inversões do operador de Dirac envolviam ler essas mesmas 50 configurações de gauge para cada valor de κ utilizado. O algoritmo usado para a inversão foi o Bi-CGStab (Seção 7.4). Após cada inversão eram calculados os correlatores de interesse [veja as equações (7.26),(7.27) e (7.28)], que eram então salvos num arquivo de dados. Cada arquivo de correlator é da ordem de kilobyte, então o armazenamento dos observáveis não representa nenhuma dificuldade computacional. Os valores do parâmetro κ utilizados nas simulações e os tempos envolvidos estão descritos na Tabela 1.

Tabela 1 – Tempo médio para a inversão de cada operador de Dirac e o tempo gasto para a simulação completa, incluindo também a determinação dos correlatores de interesse. Foram usadas 50 configurações de gauge (construídas em 25.17 horas).

κ	Inversão do operador de Dirac tempo médio (horas)	Simulação completa tempo (horas)
0.147	0.99	65.14
0.148	1.13	71.70
0.149	1.16	72.06
0.150	1.08	71.20
0.151	1.43	84.27
0.152	1.59	91.81
0.153	1.84	104.64
0.155	2.15	118.17

Fonte: Elaborada pelo autor.

Como podemos notar, à medida que aumentamos os valores de κ a inversão se torna mais lenta[‖] e bastante instável próximo do limite quiral, a saber, no ponto $\kappa \approx 0.156$

‖ As simulações foram realizadas como descrito na Seção 6.5. Nas simulações para $\kappa = 0.150, 0.155$ se usou a máquina virtual padrão com 2 vCPUs e nas outras se usou uma configuração com mais vCPUs. Neste caso, foram executadas mais simulações ao mesmo tempo e geraram-se mais instabilidades na máquina virtual. Assim, este é o motivo da simulação para $\kappa = 0.150$ ter sido mais rápida que para $\kappa = 0.148, 0.149$.

como veremos em breve. O tempo de inversão para cada operador de Dirac em $\kappa = 0.140$ é aproximadamente constante, contudo, para $\kappa = 0.155$ o tempo de inversão demorou de 1.60-3.45 horas dependendo da configuração de gauge. De fato, a inversão do operador de Dirac se torna bastante instável próximo do limite quiral e nunca conseguimos atingir este limite em simulações.

Após a determinação dos correlatores de interesse para cada valor do parâmetro κ se calculou a massa efetiva (7.19) associada a esses correlatores. Para a estimativa de erros da massa efetiva foi usado o método jackknife (Seção 6.6.4). O resultado para a massa efetiva do píon está ilustrado na Figura 17.

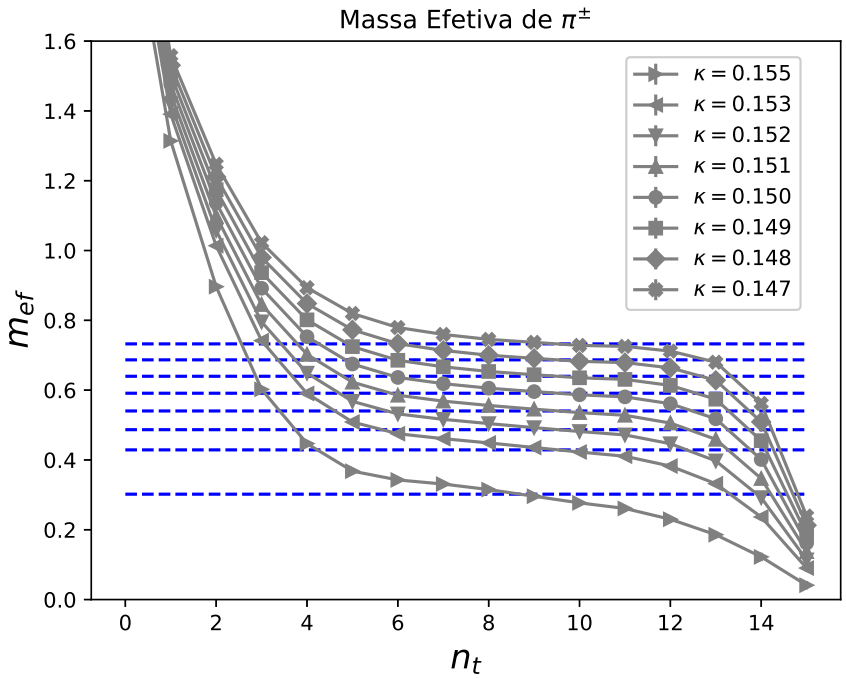

Figura 17 – Ajustes para a massa efetiva do píon.

Fonte: Elaborada pelo autor.

Os erros da massa efetiva do píon são da ordem de 10^{-3} para $\kappa = 0.140$ e chegando a alcançar 10^{-2} para $\kappa = 0.155$, por este motivo não é possível enxergá-los na Figura 17. As curvas da massa efetiva do píon normalmente apresentam um platô perto da região de $n_t = [8, 11]$. Apenas próximo do limite quiral se torna mais complicado identificar o platô, porque a curva não consegue fixar bem uma quantidade razoável de pontos sobre qualquer reta horizontal. Os detalhes dos pontos selecionados e das medidas da massa do píon para cada valor de κ estão descritos na Tabela 2. Os erros foram estimados a partir do ajuste constante como descrito na Seção 7.5.3.

Agora que obtivemos a massa do píon para diferentes valores de κ é conveniente realizar a extrapolação desses dados com a ajuda da equação (7.36) para determinar o valor de κ_c em (7.35). Contudo, uma vez que a incerteza dos dados é muito grande

Tabela 2 – Ajustes de massa efetiva.

κ	Região do ajuste			Valor da massa		
	$\pi^{\pm}$	$\rho^{\pm}$	p^{+}	$\pi^{\pm}$	$\rho^{\pm}$	p^{+}
0.147	$8-11$	$8-11$	$10-11$	0.732(4)	0.777(3)	1.234(4)
0.148	$8-11$	$8-11$	$10-11$	0.687(5)	0.736(4)	1.171(4)
0.149	$8-11$	$8-11$	$10-11$	0.640(5)	0.696(4)	1.106(4)
0.150	$8-11$	$8-11$	$10-11$	0.591(6)	0.656(4)	1.039(4)
0.151	$8-11$	$8-11$	$10-11$	0.540(6)	0.616(4)	0.972(4)
0.152	$8-11$	$8-11$	$10-15$	0.487(7)	0.577(5)	0.896(4)
0.153	$8-11$	$8-10$	$10-14$	0.429(8)	0.544(4)	0.829(3)
0.155	$6-12$	$7-10$	$8-11$	0.30(1)	0.503(3)	0.70(1)

Fonte: Elaborada pelo autor.

próximo do limite quiral, não usaremos o ponto $\kappa = 0.155$ no ajuste. De fato, a simulação realizada para este ponto deve servir apenas para mostrar a dificuldade encontrada em simulações numéricas ao se tentar aproximar do limite quiral. Como esse ponto é apenas uma fonte de erros nos ajustes, consideraremos apenas os outros pontos nas extrapolações quirais realizadas neste trabalho. Deste modo, o resultado da extrapolação quiral do píon é mostrado na Figura 18. O valor obtido foi $\kappa_c = 0.15624(8)$. Como pode ser visto, por

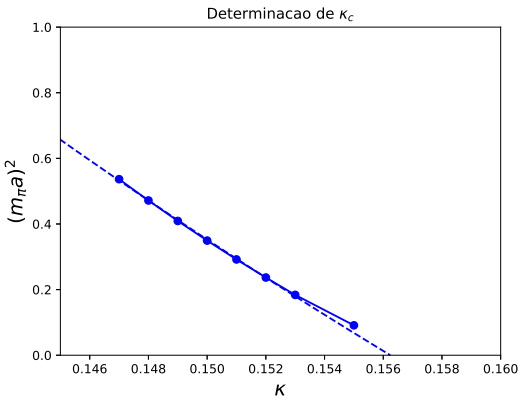

Figura 18 – Ajuste da massa do píon em unidades da rede.

Fonte: Elaborada pelo autor.

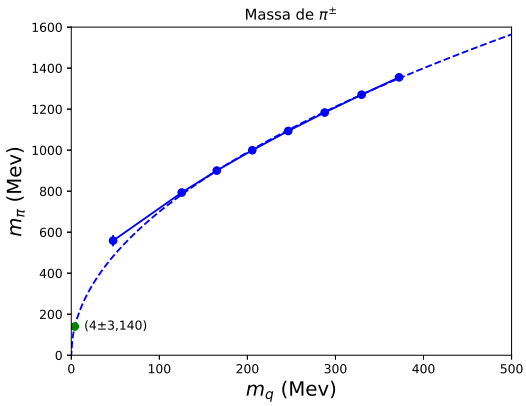

Figura 19 – Fixando a massa do píon em 140 MeV.

Fonte: Elaborada pelo autor.

exemplo, pelo trabalho de Hamber e Parisi,[5] $\kappa_c \approx 0.156$, portanto, nosso resultado está de acordo com o valor esperado.

Uma vez que determinamos o valor de κ_c e conhecendo o valor do espaçamento da rede, que como vimos na Seção 7.5.2 é $a^{-1} \approx 1850$ MeV, podemos fazer um gráfico da massa do píon em unidades físicas em função da massa do quark (7.35) em unidades físicas. Este gráfico é mostrado na Figura 19. Ao fixarmos a massa do píon em 140 MeV obtemos $m_q = 4 \pm 3$ MeV. De fato, obtemos uma incerteza de 75 % da própria massa do

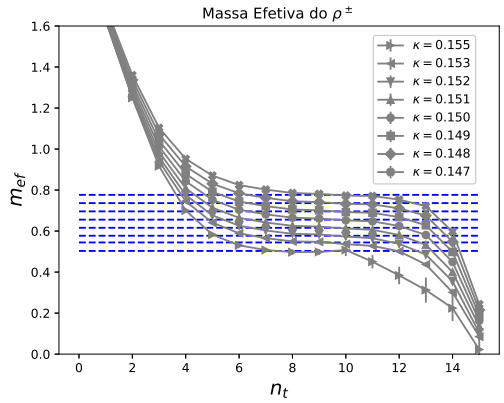

Figura 20 – Ajustes para a massa efetiva do rho.

Fonte: Elaborada pelo autor.

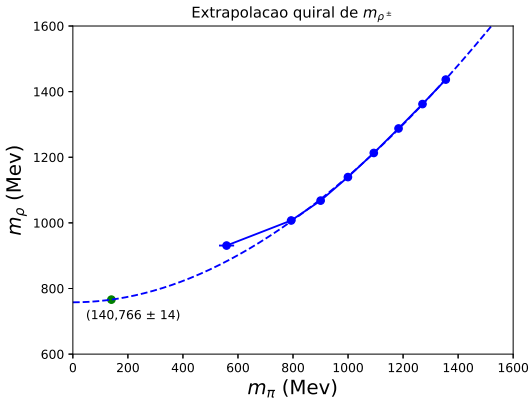

Figura 21 – Estimativa da massa experimental do rho.

Fonte: Elaborada pelo autor.

quark. Com a aproximação quenched da QCD não é possível fazer cálculos precisos da massa do quark up e down. Isto se deve ao fato de elas serem muito pequenas e próximas do limite quiral. Contudo, de acordo com o Particle Data Group, $(m_u + m_d)/2 \approx 3.5$ MeV, de forma que ainda fomos capazes de obter uma estimativa da ordem da massa do quark.[37]

Agora podemos realizar os ajustes sobre a massa efetiva do méson rho. Os resultados obtidos são mostrados na Figura 20 e na Tabela 2. Neste momento, conseguimos obter as massas dos mésons píon e rho pelo ajuste da massa efetiva para diferentes valores de κ. Assim, podemos converter essas massas em unidades físicas e obter um conjunto de valores $[m_{\pi^{\pm}}(\kappa), m_{\rho^{\pm}}(\kappa)]$ relativos aos diferentes κ. Se fizermos um gráfico desses dados e realizarmos uma extrapolação dos dados usando (7.37), encontraremos um valor para a estimativa da massa experimental do rho quando a massa do píon assume 140 MeV. O resultado deste procedimento é mostrado na Figura 21. O valor obtido para a massa do rho foi $m_{\rho^{\pm}} = 766 \pm 14$ MeV. De acordo com o Particle Data Group, o valor experimental é $m_{\rho^{\pm}}^{\text{exp}} \approx 775$ MeV. Assim, conseguimos obter um resultado que está dentro do valor esperado para a massa do rho. Mais precisamente, foi possível determinar a massa do rho com um erro relativo percentual de 1% e podendo alcançar no máximo 3% considerando a incerteza no cálculo da massa do rho. De fato, este é um resultado muito satisfatório que demonstra a validade da QCD em baixas energias e ilustra o poder da teoria na rede para determinar as propriedades do regime não-perturbativo.

Para determinar a massa do próton devemos realizar um procedimento análogo ao feito para o rho. Os resultados obtidos são mostrados na Figura 22 e na Tabela 2. A determinação do platô da massa efetiva do próton é mais complicada. Normalmente o platô se apresentou na região $n_t = [10, 11]$ em nossos resultados. Após $n_t = 11$ apareceu uma pequena contribuição da partícula propagando para trás, que é mais pesada no

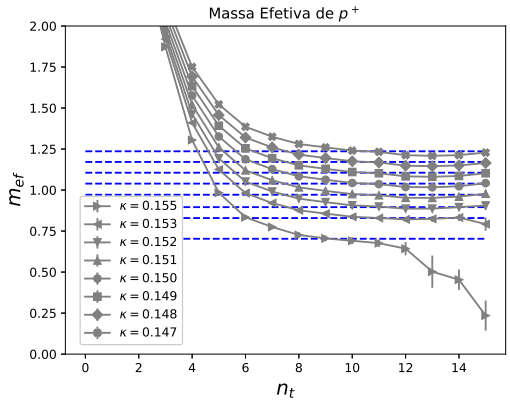

Figura 22 – Ajustes para a massa efetiva do próton.

Fonte: Elaborada pelo autor.

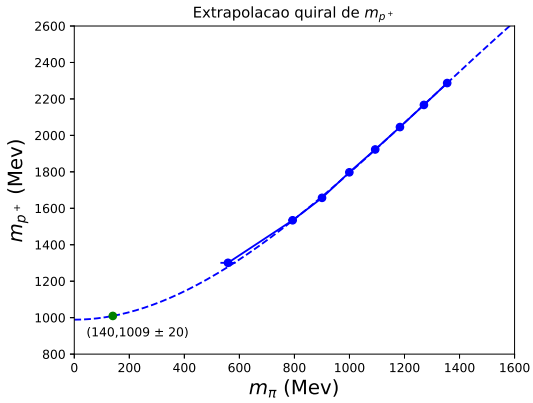

Figura 23 – Estimativa da massa experimental do próton.

Fonte: Elaborada pelo autor.

caso de bárion**, no correlator do próton. O efeito foi diminuir um pouco sua massa efetiva. Contudo, à medida que aumentamos o valor de κ, esse efeito da contribuição da partícula propagando para trás se torna menor. Para $\kappa = 0.152$ esse efeito praticamente desapareceu. Entretanto, ao aumentarmos novamente o valor de κ nos aproximamos do limite quiral. Neste caso, passam a surgir flutuações estatísticas consideráveis para n_t grande. Em particular, para $\kappa = 0.155$ o erro na massa efetiva se tornou muito alto após $n_t = 12$.

Se fizermos um gráfico com os valores obtidos da massa do próton e píon em unidades físicas para os diferentes κ, podemos realizar uma extrapolação dos dados usando (7.37). Uma estimativa da massa experimental do próton é obtida quando a massa do píon assume 140 MeV. O resultado deste procedimento é mostrado na Figura 23. O valor obtido para a massa do próton foi $m_{p^+} = 1009 \pm 20$ MeV. De acordo com o Particle Data Group, o valor experimental é $m_{p^+}^{\text{exp}} \approx 938$ MeV. Neste caso, não foi possível obter um resultado que está dentro do valor esperado para a massa do próton. Contudo, o resultado ainda é satisfatório. O erro relativo percentual da massa do próton foi de 8% e podendo alcançar até 10% considerando a incerteza no cálculo da massa do próton. De fato, essa é uma limitação da aproximação quenched da QCD. Foi realizado por F. Butler et al.[7] um estudo extenso sobre erros para a determinação do espectro de hádrons usando a aproximação quenched. Em particular, foi mostrado que a ordem do erro no cálculo da massa de hádrons poderia chegar até 9%. Apenas com a utilização de férmions dinâmicos é possível obter resultados que notavelmente concordam completamente com o resultado experimental.[8]

Para finalizar essa seção apresentaremos um gráfico que resume todos os nossos resultados para o espectro de hádrons. A Figura 24 mostra o resultado da massa de cada

** Veja a Seção 7.2.

hádron calculada neste trabalho comparada com o seu valor experimental.

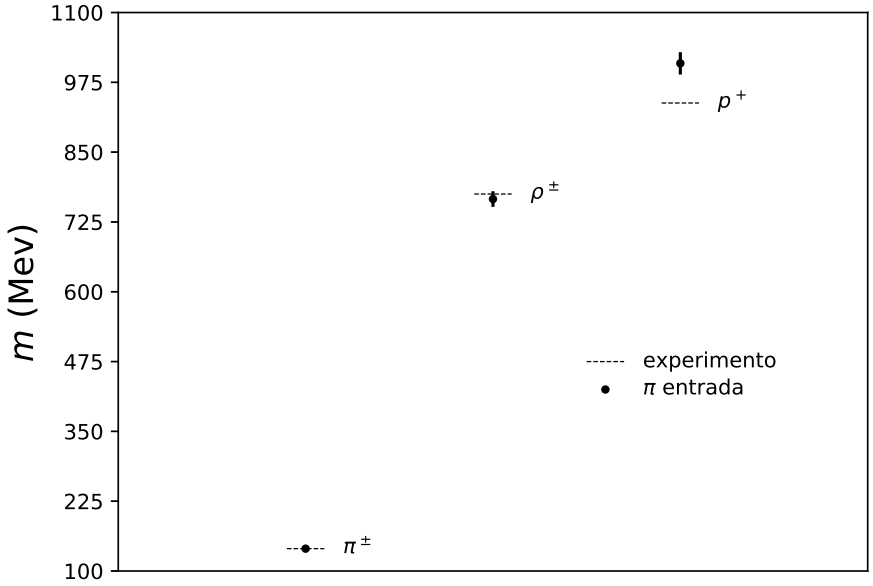

Figura 24 – Espectro de hádrons. A massa do píon foi fixada para determinar a massa do rho e próton.

Fonte: Elaborada pelo autor.

8 CONCLUSÃO

Neste trabalho foi realizado um estudo em detalhes sobre a teoria na rede da QCD. Começamos realizando a formulação de integral de trajetória da mecânica quântica para em seguida fazer uma generalização dos resultados para o caso da teoria quântica de campos. Naturalmente, também se poderia ter feito uma abordagem atacando diretamente a teoria quântica de campos. Contudo, optamos pelo procedimento mais simples possível. De fato, a generalização consistia apenas em trocar as coordenadas que apareciam em mecânica quântica por campos e tomando um cuidado adicional com a posição em que cada campo fermiônico aparecia na integral de trajetória, uma vez que variáveis fermiônicas anticomutam entre si.

Em QCD na rede as integrações para campos fermiônicos devem sempre ser resolvidas analiticamente. Desta forma, realizamos um breve estudo sobre álgebra de Grassmann para aprender a resolver as integrações que aparecem na determinação de funções de correlação fermiônicas, a saber, integrais que envolvem um produto de campos pesado por um fator de Boltzmann dado pela ação fermiônica. O resultado sempre envolve a determinação de combinações de contrações de Wick (3.55). Assim, para calcular funções de correlação fermiônicas se deve calcular o propagador fermiônico, ou simplesmente inverter o operador de Dirac. Uma vez que o propagador fermiônico domina o comportamento das funções de correlação fermiônicas, se realizou um estudo do propagador fermiônico para um férmion livre na rede. Vimos que ao se colocarem férmions na rede, a etapa de tomar o limite do contínuo apresenta o problema importante denominado dublês de férmions. De fato, na rede surgem interações fermiônicas no espaço de momentos que não existem no contínuo, o que compromete os cálculos na rede. Para resolver este problema foi mostrada a proposta de Wilson conhecida por férmions de Wilson. Ela foi a primeira formulação para férmions na rede e ainda continua sendo amplamente utilizada em simulações de QCD na rede. Naturalmente, também existem outras formulações para férmions que não abordamos neste trabalho. Qualquer formulação seja para a parte fermiônica da ação da QCD ou para a parte de glúons deve considerar a diminuição de erros de discretizações. Contudo, essas melhorias sempre vêm acompanhadas de um alto custo computacional para as suas simulações. Portanto, neste trabalho se considerou apenas a formulação padrão mais simples para a ação da QCD. Em particular, o operador de Dirac de Wilson da QCD tem uma simetria valiosa denominada hermiticidade γ_5 (7.22). Isto faz com que apenas precisemos nos preocupar com a inversão do operador de Dirac responsável pela criação da partícula propagando para a frente. Deste modo, economizamos bastante recurso computacional. Em outras versões de férmions na rede essa simetria pode se quebrar tornando os cálculos mais caros computacionalmente.

Um dos objetivos deste trabalho era mostrar a dificuldade encontrada para se colocar férmions na rede. Assim, antes de termos estudado o problema mais desafiador do espectro de hádrons foi calculado o observável físico mais simples denominado operador plaqueta. Este é um problema puramente de gauge. A parte mais complicada no cálculo do operador plaqueta foi a construção das configurações de gauge. Neste trabalho foram descritos três procedimentos para construir as configurações de gauge, sendo eles Metropolis, pseudo banho térmico e sobre-relaxação. A utilização do procedimento de sobre-relaxação deve sempre vir acompanhada de outros algoritmos que sejam capazes de garantir o peso correto das configurações. De fato, a sobre-relaxação serve apenas para diminuir a correlação entre configurações sucessivas. O procedimento pseudo banho térmico se mostrou o mais eficiente para a construção de configurações de gauge. O cálculo do operador plaqueta para uma rede 16^4 levou apenas cerca de 0.2 segundos por configuração de gauge. O operador plaqueta é realmente um observável físico muito simples de calcular, além de ter um custo computacional consideravelmente barato, sua convergência é rápida e ele apresenta flutuações estatísticas bastante pequenas. Isto o torna um observável interessante para fazer testes para avaliar se os algoritmos responsáveis pela construção de configurações de gauge estão funcionando corretamente, e também fazer estimativas para os parâmetros de simulações tais como os números de termalização e de correlação, que devem ser utilizados em simulações mais complicadas como o espectro de hádrons. De fato, esta análise foi realizada para os números de termalização e de correlação para o operador plaqueta. O valor $N_{\text{ter}} = 1000$ se mostrou suficiente para a equilibração do sistema (veja a Figura 10) e a estimativa para o número de correlação foi $N_{\text{cor}} = 45$ para o procedimento mais eficiente pseudo banho térmico (veja a Figura 14).

Após realizado o estudo do operador plaqueta foi atacada a aplicação principal deste trabalho, a saber, a determinação do espectro de hádrons. De fato, não realizamos um estudo muito detalhado do espectro de hádrons, mas consideramos apenas os mésons píon e rho e o bárion próton. Também fizemos a aproximação para dois sabores degenerados. Uma vez que os quarks up e down foram considerados com massas iguais, então foi necessário fixar a massa de apenas uma partícula nas simulações para determinar uma estimativa experimental para a massa das outras duas partículas. Escolhemos fixar a massa do píon. Também usamos a aproximação quenched da QCD. Deste modo, foi possível construir as configurações de gauge com o peso da ação pura de gauge. Para isso, utilizamos o algoritmo pseudo banho térmico com a etapa opcional de sobre-relaxação. Para o espectro de hádrons não é possível fazer uma estimativa dos parâmetros de simulações como o número de termalização e correlação, pois isso teria um custo computacional muito grande. Assim, usamos um valor suficientemente grande para esses parâmetros, tendo como base os resultados para o operador plaqueta. O número de termalização foi 1000 para o operador plaqueta, então usamos 10000 para o espectro de hádrons. O número de correlação foi 45 para o operador plaqueta, então usamos 250 para o espectro de hádrons. De fato, esses

parâmetros nos dão uma boa segurança de termos construído apenas configurações de gauge descorrelacionadas no equilíbrio.

A parte mais complicada nas simulações do espectro de hádrons é a inversão do operador de Dirac. Para isso, usamos o método Bi-CGStab por ser consideravelmente eficiente e de fácil implementação. Para uma rede $16^3 \times 32$, levou uma média de 1-2 horas o tempo de inversão por configuração, dependendo da massa do quark. Para comparação, o tempo para o cálculo do operador plaqueta seria de décimos de segundo. Esta diferença considerável de tempo ilustra muito bem a dificuldade de colocar quarks na rede. A determinação do espectro de hádrons é a aplicação mais simples envolvendo funções de correlação fermiônicas, apesar de ser bastante complicada. Além de ter um custo computacional alto, os correlatores de hádrons sempre possuem bastante flutuações estatísticas. Somente após a determinação de vários correlatores é possível ter uma medida confiável do correlator, que é a média de todos os correlatores. Para calcular a massa de hádrons para diferentes valores da massa do quark, decidimos realizar um ajuste constante sobre a massa efetiva. Uma estimativa dos erros estatísticos da massa efetiva foi realizada utilizando o método jackknife. Para atingir o valor da massa fixada do píon foi necessário realizar extrapolações quirais. A partir desse ponto foi possível estimar a massa do rho, próton e também do quark. O resultado para a massa do quark teve um erro de 75%. Deste modo, fomos capazes apenas de estimar a ordem da massa do quark. A massa da partícula rho teve um resultado muito satisfatório. Considerando o desvio no resultado, conseguimos determinar o seu valor com um erro percentual relativo de 3%. A massa do próton calculada não ficou dentro do valor experimental, mas ainda conseguimos obter um resultado com um desvio de 10%. De fato, este resultado também é satisfatório. Para cálculos precisos seria necessário utilizar férmions dinâmicos. Apesar da limitação na precisão de cálculos que envolvem a aproximação quenched, ela ainda tem a importância de mostrar resultados que servem como uma demonstração de que a QCD é a teoria que descreve as interações fortes no regime de baixas energias.

E, por fim, neste trabalho foram explorados muitos dos aspectos que estão envolvidos em simulações numéricas de QCD na rede. Mesmo que não tenhamos realizado um cálculo extenso do espectro de hádrons, nos limitamos a dois sabores de quarks degenerados leves, fomos capazes de reproduzir muitos dos resultados que eram obtidos por colaborações nos anos de 1990s. E a teoria na rede da QCD é uma ferramenta muito poderosa, principalmente quando se tem muito recurso computacional disponível, para lidar com problemas de QCD no domínio não-perturbativo.

REFERÊNCIAS

1 YOSHIÉ, T. Light hadron spectrum from quenched lattice qcd: results from the cp-pacs. **Progress of Theoretical Physics**, v. 105, n. 1, p. 37–75, 2001.

2 WILSON, K. G. Confinement of quarks. **Physical Review D**, v. 10, n. 8, p. 2445, 1974.

3 _____. The origins of lattice gauge theory. **Nuclear Physics B - proceedings supplements**, v. 140, p. 3–19, 2005. doi: 10.1016/j.nuclphysbps.2004.11.271.

4 CREUTZ, M. Monte Carlo study of quantized SU(2) gauge theory. **Physical Review D**, v. 21, n. 8, p. 2308, 1980.

5 HAMBER, H.; PARISI, G. Numerical estimates of hadronic masses in a pure su (3) gauge theory. **Physical Review Letters**, v. 47, n. 25, p. 1792, 1981.

6 WEINGARTEN, D. Monte Carlo evaluation of hadron masses in lattice gauge theories with fermions. **Physics Letters B**, v. 109, n. 1-2, p. 57–62, 1982.

7 BUTLER, F. et al. Hadron masses from the valence approximation to lattice QCD. **Nuclear Physics B**, v. 430, n. 1, p. 179–228, 1994.

8 DÜRR, S. et al. Ab initio determination of light hadron masses. **Science**, v. 322, n. 5905, p. 1224–1227, 2008.

9 ROTHE, H. J. **Lattice gauge theories:** an introduction. 3rd. ed. Hackensack: World Scientific Publishing Company, 2005. (World scientific lecture notes in physics, v. 74).

10 GREINER, W.; REINHARDT, J. **Field quantization**. Berlin: Springer Science, 2013.

11 ZEE, A. **Quantum field theory in a nutshell**. Princeton: Princeton University Press, 2010.

12 GATTRINGER, C.; LANG, C. **Quantum chromodynamics on the lattice:** an introductory presentation. Berlin: Springer Science, 2009. (Lecture notes in physics, v. 788).

13 NIELSEN, H. B.; NINOMIYA, M. No go theorem for regularizing chiral fermions. **Physics Letter B**, v. 105, n. 2-3, p. 219–223, 1981.

14 _____. Absence of neutrinos on a lattice: (i) proof by homotopy theory. **Nuclear Physics B**, v. 185, n. 1, p. 20–40, 1981.

15 _____. Absence of neutrinos on a lattice: (ii) intuitive topological proof. **Nuclear Physics B**, v. 193, n. 1, p. 173–194, 1981.

16 GINSPARG, P. H.; WILSON, K. G. A remnant of chiral symmetry on the lattice. **Physical Review D**, v. 25, n. 10, p. 2649, 1982.

17 PESKIN, M. E.; SCHROEDER, D. V. **An introduction to quantum field theory**. Florida: CRC Press, 2018.

18 LEPAGE, G. P. **Lattice QCD for novices**. Disponível em: <https://arxiv.org/pdf/hep-lat/0506036.pdf>. Acesso em: 23 jan. 2018.

19 SOKAL, A. Monte Carlo methods in statistical mechanics: foundations and new algorithms. In: _____. **Functional integration:** basics and applications. Boston: Springer, 1997. p. 131–192.

20 METROPOLIS, N. et al. Equation of state calculations by fast computing machines. **Journal of Chemical Physics**, v. 21, n. 6, p. 1087–1092, 1953.

21 LANDAU, D. P.; BINDER, K. **A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics**. 4th. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2014.

22 CABIBBO, N.; MARINARI, E. A new method for updating SU(N) matrices in computer simulations of gauge theories. **Physics Letters B**, v. 119, n. 4-6, p. 387–390, 1982.

23 PIETARINEN, E. String tension in su (3) lattice gauge theory. **Nuclear Physics B**, v. 190, n. 2, p. 349–356, 1981.

24 CREUTZ, M. Overrelaxation and Monte Carlo simulation. **Physical Review D**, v. 36, n. 2, p. 515, 1987.

25 LUCINI, B.; TEPER, M. SU(N) gauge theories in four dimensions: exploring the approach to $N = \infty$. **Journal of High Energy Physics**, v. 2001, n. 06, p. 050, 2001.

26 BRAINERD, W. S.; GOLDBERG, C. H.; ADAMS, J. C. **Programmer's guide to Fortran 90**. New York: McGraw-Hill, 1990.

27 WOLFF, U. et al. Monte Carlo errors with less errors. **Computer Physics Communications**, v. 156, n. 2, p. 143–153, 2004.

28 VORST, H. A. Van der. Bi-CGSTAB: a fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems. **SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing**, v. 13, n. 2, p. 631–644, 1992.

29 FROMMER, A. et al. Accelerating Wilson fermion matrix inversions by means of the stabilized biconjugate gradient algorithm. **International Journal of Modern Physics C**, v. 5, n. 6, p. 1073–1088, 1994.

30 BARRETT, R. et al. **Templates for the solution of linear systems:** building blocks for iterative methods. Philadelphia: Siam, 1994.

31 BERNARD, C. W.; GOLTERMAN, M. F. Chiral perturbation theory for the quenched approximation of qcd. **Physical Review D**, v. 46, n. 2, p. 853, 1992.

32 BOOTH, M.; CHILADZE, G.; FALK, A. F. Quenched chiral perturbation theory for vector mesons. **Physical Review D**, v. 55, n. 5, p. 3092, 1997.

33 LABRENZ, J. N.; SHARPE, S. R. Quenched chiral perturbation theory for baryons. **Physical Review D**, v. 54, n. 7, p. 4595, 1996.

34 BALI, G. S.; SCHILLING, K. Static quark - anti-quark potential: scaling behavior and finite size effects in SU(3) lattice gauge theory. **Physical Review D**, v. 46, n. 6, p. 2636–2646, 1992.

35 OLIPHANT, T. E. Python for scientific computing. **Computing in Science & Engineering**, v. 9, n. 3, p. 10–20, 3 2007.

36 MORÉ, J. J. The Levenberg-Marquardt algorithm: implementation and theory. In: WATSON, G. A. (Ed.). **Numerical analysis**. Berlin: Springer, 1978. p. 105–116.

37 TANABASHI, M. et al. Review of particle physics. **Physical Review D**, v. 98, n. 3, p. 030001, 2018.

APÊNDICE A – MATRIZES GAMA

Neste apêndice será mostrada a representação quiral no espaço euclidiano das matrizes gama e suas principais propriedades.[12]

As matrizes gama euclidianas γ_μ, $\mu = 1, 2, 3, 4$ obedecem às seguintes relações de anticomutação

$$\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = 2\delta_{\mu\nu}\mathbb{1}\,. \tag{A.1}$$

Além das matrizes γ_μ, $\mu = 1, 2, 3, 4$, também podemos definir γ_5 como o produto

$$\gamma_5 = \gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4\,. \tag{A.2}$$

A matriz γ_5 anticomuta com todas as matrizes γ_μ, $\mu = 1, 2, 3, 4$ e obedece $\gamma_5^2 = \mathbb{1}$.

A forma explicita para as matrizes γ_μ, $\mu = 1, 2, 3, 4, 5$ pode ser escrita como

$$\gamma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \gamma_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \gamma_3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\gamma_4 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \gamma_5 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}. \tag{A.3}$$

Existe apenas mais uma propriedade de interesse das matrizes γ_μ, $\mu = 1, 2, 3, 4, 5$ que precisamos saber

$$\gamma_\mu = \gamma_\mu^\dagger = \gamma_\mu^{-1}\,. \tag{A.4}$$

APÊNDICE B – TRANSFORMADA DE FOURIER DA REDE

O objetivo deste apêndice é discutir a transformada de Fourier $\tilde{f}(p)$ de funções $f(n)$ definidas sobre a rede. A rede é dada por

$$\Lambda = \{n = (n_1, n_2, n_3, n_4) | n_\mu = 0, 1, \ldots, N_\mu - 1\} \ . \tag{B.1}$$

Podemos escrever o número total de pontos da rede como

$$|\Lambda| = N_1 N_2 N_3 N_4 \, . \tag{B.2}$$

Vamos impor condições periódicas de contorno

$$f(n + \hat{\mu} N_\mu) = f(n) \tag{B.3}$$

para cada direção μ. Aqui $\hat{\mu}$ denota o vetor unitário na direção μ.

O espaço de momentos $\tilde{\Lambda}$, que corresponde à rede Λ com as condições de contorno (B.3), é definido como

$$\tilde{\Lambda} = \left\{ p = (p_1, p_2, p_3, p_4) | p_\mu = \frac{2\pi}{a N_\mu} k_\mu, k_\mu = -\frac{N_\mu}{2} + 1, \ldots, \frac{N_\mu}{2} \right\} \, . \tag{B.4}$$

A fórmula básica associada à transformada de Fourier da rede é (aqui l é um inteiro com $0 \leq l \leq N - 1$)

$$\frac{1}{N} \sum_{j=-N/2+1}^{N/2} \exp\left(i \frac{2\pi}{N} l j \right) = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} \exp\left(i \frac{2\pi}{N} l j \right) = \delta_{l0} \, . \tag{B.5}$$

Para ver isso, note que para $l = 0$ essa fórmula é trivial

$$\frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} 1 = 1 \, .$$

Agora para $l \neq 0$ segue da identidade algébrica bem conhecida

$$\frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} q^j = \frac{1 - q^N}{1 - q} \quad \text{para} \quad q = \exp\left(i \frac{2\pi}{N} l \right) \, ,$$

ou seja,

$$q^N = \exp\left(i 2\pi l \right) = 1 \, ,$$

que

$$\frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} \exp\left(i \frac{2\pi}{N} l j \right) = 0 \qquad \text{para} \ \ l \neq 0 \, .$$

Uma consequência direta de (B.5) é

$$\begin{aligned}\frac{1}{N_\mu}\sum_{j=-N_\mu/2+1}^{N_\mu/2}\exp\left[i\frac{2\pi}{aN_\mu}(n_\mu-n'_\mu)ja\right] &= \frac{1}{N_\mu}\sum_{p_\mu\in\tilde{\Lambda}}\exp\left[ip_\mu(n_\mu-n'_\mu)a\right]\\ &= \delta_{nn'}\,,\end{aligned}\tag{B.6}$$

onde $n_\mu, n'_\mu \in \Lambda$.

Agora podemos combinar as quatro somas unidimensionais (com $\mu = 1, 2, 3, 4$) em (B.6) para obter a seguinte identidade

$$\frac{1}{|\Lambda|}\sum_{p\in\tilde{\Lambda}}\exp\left[ip\cdot(n-n')a\right] = \delta(n-n') = \delta_{n_1n'_1}\delta_{n_2n'_2}\delta_{n_3n'_3}\delta_{n_4n'_4}\,,\tag{B.7}$$

onde $p\cdot(n-n') = \sum_{\mu=1}^{4} p_\mu n_\mu$.

Naturalmente se realizarmos um procedimento análogo para a obtenção da identidade (B.7), podemos mostrar que

$$\frac{1}{|\Lambda|}\sum_{n\in\Lambda}\exp\left(i(p-p')\cdot na\right) = \delta(p-p') \equiv \delta_{k_1k'_1}\delta_{k_2k'_2}\delta_{k_3k'_3}\delta_{k_4k'_4}\,.\tag{B.8}$$

Note que o lado direito em (B.8) é um produto de quatro deltas de Kronecker para os inteiros k_μ que marcam as componentes p_μ do momento.

Se definirmos a transformada de Fourier por

$$\tilde{f}(p) = \frac{1}{\sqrt{|\Lambda|}}\sum_{n\in\Lambda} f(n)\exp\left(-ip\cdot na\right)\,,\tag{B.9}$$

então a transformada inversa será dada por

$$f(n) = \frac{1}{\sqrt{|\Lambda|}}\sum_{p\in\tilde{\Lambda}}\tilde{f}(p)\exp\left(ip\cdot na\right)\,.\tag{B.10}$$

Para ver isso basta notar que

$$\begin{aligned}f(n) &= \frac{1}{\sqrt{|\Lambda|}}\sum_{p\in\tilde{\Lambda}}\tilde{f}(p)\exp\left(ip\cdot na\right)\\ &= \frac{1}{|\Lambda|}\sum_{n'\in\Lambda}\sum_{p\in\tilde{\Lambda}} f(n')\exp\left(ip\cdot(n-n')a\right)\\ &= \frac{1}{|\Lambda|}\sum_{n'\in\Lambda} f(n')\delta(n-n')\\ &= f(n)\,,\end{aligned}$$

onde na segunda linha fizemos uso de (B.9) e na terceira linha de (B.7).

APÊNDICE C – GRUPOS DE LIE SU(N)

A definição da representação de SU(N) é dada por matrizes $N \times N$ complexas que são unitárias e possuem determinante 1. Este conjunto de matrizes é fechado sob a multiplicação matricial: se Ω_1 e Ω_2 são elementos de SU(N), então seu produto $\Omega_1\Omega_2$ também é um elemento de SU(N). A matriz unidade é um elemento de SU(N) e para cada matriz SU(N) existe uma inversa (a matriz conjugada hermitiana). Assim, o conjunto SU(N) forma um grupo. Uma vez que a operação do grupo – a multiplicação matricial – não é comutativa, os grupos SU(N) são *grupos não abelianos*.

Para descrever matrizes de SU(N) são necessários N^2-1 parâmetros. Uma maneira de representar essas matrizes é escrevê-las como exponenciais das matrizes da base T_j, os assim denominados *geradores*. Em particular, um elemento de SU(N) pode ser escrito como

$$\Omega = \exp\left(i \sum_{j=1}^{N^2-1} \omega^{(j)} T_j \right) , \tag{C.1}$$

onde $\omega^{(j)}$, $j = 1, 2, \ldots, N^2 - 1$, são números reais necessários para parametrizar Ω. Os parâmetros $\omega^{(j)}$ podem ser mudados continuamente, tornando SU(N) em *grupos de Lie*, que são os grupos cujos elementos dependem continuamente de seus parâmetros. Para cobrir todo o espaço do grupo os parâmetros devem variar sobre intervalos finitos, fazendo com que os grupos SU(N) também sejam chamados de grupos de Lie *compactos*.

Os geradores T_j, $j = 1, 2, \ldots, N^2-1$, são escolhidos como matrizes $N\times N$ complexas, hermitianas e com traço nulo que obedecem à condição de normalização

$$\mathrm{tr}\,[T_j T_k] = \frac{1}{2}\delta_{jk} \,. \tag{C.2}$$

Além disso, os geradores obedecem a uma álgebra de relações de comutação

$$[T_j, T_k] = i f_{jkl} T_l \,, \tag{C.3}$$

onde os coeficientes completamente anti-simétricos são chamados de *constantes de estrutura*. Abaixo descreveremos, apenas para o grupo SU(2), uma representação dos geradores que serão utilizados na construção de configurações de gauge em QCD na rede, como pode ser visto na Seção 6.3. De fato, em simulações numéricas as matrizes de SU(3) são construídas a partir de matrizes de SU(2).

Os exponentes da representação (C.1) também possuem uma estrutura interessante. As combinações lineares

$$\sum_{j=1}^{N^2-1} \omega^{(j)} T_j \tag{C.4}$$

de T_j formam a assim chamada *álgebra de Lie* su(N). Suas propriedades de comutação são governadas por (C.3). Elementos de su(N) são também matrizes $N \times N$ complexas, contudo, eles têm propriedades diferentes dos elementos do grupo. Uma diferença importante é que a matriz unidade não é um elemento da álgebra (todos os T_j tem traço nulo).

Neste trabalho precisaremos utilizar elementos de SU(3), contudo, será conveniente escrevê-los a partir de elementos de SU(2). A representação padrão para os geradores de SU(2) é dada por

$$T_j = \frac{1}{2}\sigma_j \,, \tag{C.5}$$

onde as matrizes de Pauli são dadas por

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad , \quad \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad , \quad \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} . \tag{C.6}$$

As constantes de estrutura de SU(2) são particularmente simples, elas são dadas pelo tensor completamente anti-simétrico $f_{jkl} = \epsilon_{jkl}$.

Agora deveremos mostrar uma propriedade importante da derivada de elementos do grupo SU(N) que será utilizada no estudo da transformação de gauge na Seção 5.2.1. Se $\Omega(\omega)$ é um elemento de SU(N), então

$$M_k(\omega) = i\frac{\partial \Omega(\omega)}{\partial \omega^{(k)}}\Omega(\omega)^\dagger \quad \in \quad \mathrm{su}(N) \,. \tag{C.7}$$

Para provar a afirmação (C.7) é necessário mostrar que $M_k(\omega)$ obedece às propriedades da álgebra de Lie, isto é, que ele é hermitiano e possui traço nulo.

Para mostrar que ele é hermitiano devemos diferenciar $\Omega(\omega)\Omega(\omega)^\dagger = \mathbb{1}$ em relação a $\omega^{(k)}$, isto é,

$$\frac{\partial \Omega(\omega)}{\partial \omega^{(k)}}\Omega(\omega)^\dagger + \Omega(\omega)\frac{\partial \Omega(\omega)^\dagger}{\partial \omega^{(k)}} = 0 \,. \tag{C.8}$$

Então

$$M_k(\omega)^\dagger = \left(i\frac{\partial \Omega(\omega)}{\partial \omega^{(k)}}\Omega(\omega)^\dagger\right)^\dagger = -i\Omega(\omega)\frac{\partial \Omega(\omega)^\dagger}{\partial \omega^{(k)}} = i\frac{\partial \Omega(\omega)}{\partial \omega^{(k)}}\Omega(\omega)^\dagger = M_k(\omega) \,, \tag{C.9}$$

onde no terceiro passo usamos (C.8).

Para mostrar que $M_k(\omega)$ tem traço nulo se usa a propriedade que o determinante de um elemento de SU(N) é igual a 1, assim, se diferencia $\det[\Omega(\omega)]$ em relação a $\omega^{(k)}$, isto é,

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial \det[\Omega(\omega)]}{\partial \omega^{(k)}} = \det[\Omega(\omega)]\,\mathrm{tr}\left[\Omega(\omega)^{-1}\frac{\partial \Omega(\omega)}{\partial \omega^{(k)}}\right] = \mathrm{tr}\left[\frac{\partial \Omega(\omega)}{\partial \omega^{(k)}}\Omega(\omega)^\dagger\right] \\ &= \mathrm{tr}\left[M_k(\omega)\right] \,. \end{aligned} \tag{C.10}$$

No primeiro passo foi aplicada uma fórmula padrão para a derivada do determinante de uma matriz. No segundo passo foram usadas as propriedades usuais de matrizes de SU(N) e do traço de produtos de matrizes. As equações (C.9) e (C.10) estabelecem que $M_k(\omega) \in \mathrm{su}(N)$.

A partir de (C.7) segue que para as matrizes de transformação de gauge $\Omega(x)$ com coeficientes $\omega^{(k)}(x)$, dependendo do índice do espaço-tempo x, a combinação $i(\partial_\mu \Omega(x))\Omega(x)^\dagger$ está na álgebra de Lie, uma vez que

$$i[\partial_\mu \Omega(x)]\Omega(x)^\dagger = \sum_k \left\{ i \left[\frac{\partial}{\partial \omega^{(k)}(x)} \Omega(\omega(x)) \right] \Omega(\omega(x))^\dagger \right\} \partial_\mu \omega^{(k)}(x) \,, \tag{C.11}$$

e o lado direito é uma combinação linear de elementos de su(N) com coeficientes reais $\partial_\mu \omega^{(k)}(x)$.

APÊNDICE D – MEDIDA DE HAAR

Neste apêndice será realizado um breve estudo de integração sobre as variáveis de ligação.

A ação da QCD é construída exigindo que ela seja invariante por transformações de gauge. Assim, a ação da QCD na rede é invariante por transformações de gauge das variáveis de ligação, isto é,

$$S_{\mathrm{QCD}}[\psi, \bar{\psi}, U'] = S_{\mathrm{QCD}}[\psi, \bar{\psi}, U]\,, \tag{D.1}$$

onde a transformação das variáveis de ligação é definida por (5.26). Como para qualquer integral, o resultado da integral de trajetória deve ser invariante sob uma mudança de variável, em particular sob as transformações de gauge (5.26). Para a função de partição isto exige que

$$\begin{aligned} Z &= \int D(\bar{\psi}\psi)D(U)e^{-S_{QCD}[\psi,\bar{\psi},U]} = \int D(\bar{\psi}\psi)D(U')e^{-S_{QCD}[\psi,\bar{\psi},U']} \\ &= \int D(\bar{\psi}\psi)D(U')e^{-S_{QCD}[\psi,\bar{\psi},U]}\,. \end{aligned} \tag{D.2}$$

Naturalmente podemos notar que

$$D(U) = D(U')\,. \tag{D.3}$$

Usando o fato que $D(U)$ é um produto de medida, derivamos a condição

$$dU_\mu(n) = dU_\mu(n)' = d\left[\Omega(n)U_\mu(n)\Omega(n+\hat{\mu})^\dagger\right]\,, \tag{D.4}$$

para a integração sobre as variáveis de ligação individuais. Esta é uma das propriedades que define a medida de Haar.

As matrizes de transformação $\Omega(n)$ e $\Omega(n+\hat{\mu})$ em (D.4) podem ser escolhidas independentemente, assim, a medida dU para um elemento do grupo deve ser invariante sob a multiplicação à esquerda e à direita por outro elemento do grupo $V \in G$, isto é,

$$dU = d(UV) = d(VU)\,. \tag{D.5}$$

Esta equação, junto com a normalização

$$\int dU = 1\,, \tag{D.6}$$

são propriedades que definem a medida de Haar para a integração sobre grupos compactos como SU(3). Agora que vimos algumas propriedades da medida de Haar será conveniente

listarmos algumas integrais e seus resultados.

$$\int_{SU(3)} dU U_{ab} = 0\,, \tag{D.7a}$$

$$\int_{SU(3)} dU U_{ab} U_{cd} = 0\,, \tag{D.7b}$$

$$\int_{SU(3)} dU U_{ab} (U^\dagger)_{cd} = \frac{1}{3}\delta_{ad}\delta_{bc}\,, \tag{D.7c}$$

$$\int_{SU(3)} dU U_{ab} U_{cd} U_{ef} = \frac{1}{6}\epsilon_{ace}\epsilon_{bdf}\,. \tag{D.7d}$$

As integrais acima podem ser calculadas usando as propriedades da medida de Haar. Apenas como exemplo iremos calcular explicitamente a primeira integral (D.7a). Assim, considere uma função $f(U)$, então

$$\int_{SU(3)} dU f(U) \;=\; \int_{SU(3)} d(VU) f(VU) = \int_{SU(3)} dU f(VU)\,. \tag{D.8}$$

Inicialmente foi feita uma mudança de coordenadas e em seguida usamos a propriedade (D.5) da medida de Haar. O elemento V é uma matriz arbitrária SU(3). Se tomarmos $f(U) = U$, então podemos ver que

$$\int_{SU(3)} dU U_{ab} = \int_{SU(3)} dU (VU)_{ab} = V_{ac} \int_{SU(3)} dU U_{cb}\,, \tag{D.9}$$

onde há uma soma implícita sobre o índice c repetido. Para satisfazer essa equação não trivialmente, devemos ter que $V_{ac} = \delta_{ab}$. Contudo, a ultima equação deve ser válida para qualquer elemento V do grupo, de modo que a própria integral deve desaparecer, assim estabelecendo (D.7a).