UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Estudo Numérico da Transição de Fase na QCD a Temperatura Finita

Rafael Bertolini Frigori

Dissertação apresentada ao Instituto de Física de São Carlos, da Universidade de São Paulo, para a obtenção do título de Mestre em Ciências: Física Básica.

Orientadora: Prof^a. Dr^a. Tereza Cristina da Rocha Mendes

São Carlos – 2005



Em homenagem ao ano mundial da física.

Se teus projetos são para um ano — semeia o grão. Se são para dez anos — planta a árvore. Se são para cem anos — instrua o povo. Semeando uma vez o grão — colherás uma vez. Plantando a árvore — colherás dez vezes. Instruindo o povo — colherás cem vezes. Se deres um peixe a um homem — ele comerá uma vez. Se o ensinares a pescar — ele comerá a vida inteira.

Kuan-Tzu, sábio chinês, séc. VII A.C.

Agradecimentos

Esta dissertação encerra um projeto pessoal iniciado pelo autor há quase uma década. É pois, chegada a hora de agradecer àqueles que, a sua própria maneira, contribuiram para que meus objetivos tenham sido alcançados em sua plenitude.

A Deus, por mais esta oportunidade de aprendizado.

À Tereza e ao Attilio pelo alto astral com que conduziram, competentemente, a orientação e co-orientação deste trabalho de mestrado.

Ao Esmerindo por apresentar-me, durante minha iniciação científica, à beleza onipresente dos grupos de Lie.

Ao Reginaldo pelas motivantes discussões, desde os meus primeiros dias universitários.

Ao Fontanari e ao Lidério, pela generosidade em concederem-me imprescindíveis recursos computacionais.

A todos os professores e funcionários do IFSC, particularmente ao prof. Djalma, ao pessoal da biblioteca Bernhard Gross e à nossa secretária Maria Cristina (a Cris).

Aos contribuintes do estado de São Paulo que, por meio da FAPESP, financiaram a execução deste trabalho.

A todos os meus verdadeiros amigos: irmãos que escolhi em vida.

Aos meus pais e a minha irmã, que tanto amo, por ensinarem-me a pescar.

Resumo

Em nossas simulações, efetuamos uma cuidadosa análise numérica dos algoritmos de Monte Carlo empregados na termalização de teorias de gauge e sistemas de spins contínuos. Dentre eles, apresentamos uma nova proposta que permite reduzir em cerca de 25% os tempos computacionais. Aplicamos este novo algoritmo ao estudo numérico da transição de desconfinamento da teoria de Yang-Mills (YM) SU(2) tridimensional, a temperatura finita, em redes com volumes de $50^2 \times 4$ sítios. Por fim, também utilizamos técnicas de Escala de tamanho finito (FSS), Dinâmica de Tempos Curtos e Métodos Variacionais para extrair os expoentes críticos e espectro de massas de blindagem desta teoria.

Abstract

In our numerical simulations, we have done a careful analysis of Monte-Carlo algorithms usually applied in the thermalization of gauge theories and continuous-spin systems. Among them we present a new proposal that enables a reduction of roughly 25% in the computational time. We apply this new algorithm to a numerical study of the deconfinement phase transition of the three-dimensional SU(2) Yang-Mills (YM) theory at finite temperature, using lattices with $50^2 \times 4$ sites. We also use Finite-Size-Scaling techniques, Short-Time Dynamics and Variational Methods to extract critical exponents and the spectrum of screening masses of the theory.

Lista de Figuras

2.1	Decaimentos lépton-hádron e a determinação do número de cargas de cor [3]	23
2.2	Diagrama de Feynman para o espalhamento inelástico profundo (DIS). Ref.	
	[3]	24
2.3	Plaqueta: produto ordenado dos elos ao longo de uma célula elementar da	
	rede. Ref. [22]	25
2.4	O loop de Wilson. Ref. [22]	30
3.1	À esquerda, diagrama P-T ilustrando transições sólido-líquido-gás. À dire-	
	ita, diagrama H-T ilustrando transições magneto-paramagneto. Ref. $\left[27\right] .$.	32
3.2	Comportamento crítico universal de uma série de substâncias químicas ajus-	
	tado por um polinômio cúbico. Ref [27]	33
3.3	Transição ordem-desordem em um gás de rede. Note o aparecimento de	
	clusters de todos os tamanhos para $T = T_c$ (e), (f). Ref [27]	35
3.4	Ao atingir $T = T_c$ (d) a mistura de ciclohexano-anilina exibe o fenômeno da	
	opalescência crítica. Ref [27]	36
3.5	Loop de Polyakov: em uma representação esquemática bidimensional. Ref.	
	[22]	42
5.1	Modelo O(4) em 1d (128 sítios), observável: energia por spin	61
5.2	Modelo O(4) em 1d (256 sítios), observável: energia por spin	61
5.3	Modelo O(4) em 1d (512 sítios), observável: energia por spin	62
5.4	Modelo O(4) em 1 d (128 sítios), observável: susceptibilidade magnética .	62
5.5	Modelo O(4) em 1 d (256 sítios), observável: susceptibilidade magnética	63
5.6	Modelo O(4) em 1d (512 sítios), observável: susceptibilidade magnética	63
5.7	Modelo O(4) em 1d (128 sítios), observável: energia por spin	64
5.8	Modelo O(4) em 1d (256 sítios), observável: energia por spin	65
5.9	Modelo O(4) em 1d (512 sítios), observável: energia por spin	65

Modelo O(4) em 1 d (128 sítios), observável: susceptibilidade magnética	66
Modelo $O(4)$ em 1d (256 sítios), observável: susceptibilidade magnética	66
Modelo $O(4)$ em 1d (512 sítios), observável: susceptibilidade magnética	67
Análise comparativa de desempenho, modelo O(4) 1d, observável: tempo de	
correlação da energia	68
Análise comparativa de desempenho, modelo $O(4)$ 1d, observável: tempo de	
correlação da susceptibilidade magnética. Dentre os observáveis, este é o de	
decaimento temporal mais lento	69
Análise comparativa de desempenho, teoria de gauge SU(2) 2 d $-$ 15.000	
Iterações, 5.000 varreduras iniciais — observável: tempo de correlação do	
loop de Polyakov.	72
Análise comparativa de desempenho, teoria de gauge SU(2) 2 d $-$ 15.000	
Iterações, 5.000 varreduras iniciais — observável: tempo de correlação da	
plaqueta de lado crítico	73
Plaqueta: curva contínua, sem pontos de inflexão. Não constatamos efeitos	
de volume finito.	75
Parâmetro de ordem: loop de Polyakov. Curva contínua com uma inflexão	
no intervalo $\beta \in [6.3, 6.6],$ que sugere a presença de um ponto crítico. Com-	
portamentos quantitativamente distintos das curvas demonstram a presença	
de marcantes efeitos de volume finito	75
Suscetibilidade $Magnética$. Sugere possível comportamento divergente — a	
volume infinito — do parâmetro de ordem na região crítica, que aparece no	
intervalo de máxima curvatura: $\beta \in [6.5, 7.0]$.	76
Método do cumulante de Binder. Permite uma máxima precisão na deter-	
minação do ponto crítico — β =6.50(5) — pois leva em consideração efeitos	
de volume finito: note que redes de lado menor que 40 não cruzam o ponto	
fixo. O valor obtido é compatível com $\beta = 6.52(3)$, encontrado em [37] com	
outros métodos.	77
Análise de FSS. Determinação da razão $\frac{\gamma}{\nu}$ entre expoentes críticos estáticos.	
Curva em vermelho: regressão obtida ajustando (4.35) aos dados computa-	
cionais.	79
Determinação da região crítica pelo método da Dinâmica de Tempos Curtos.	
No intervalo $\beta \in [3.43, 3.69]$ o comportamento é linear, sugerindo compor-	
tamento de escala por lei de potência	80
	Modelo O(4) em 1d (128 sítios), observável: susceptibilidade magnética Modelo O(4) em 1d (256 sítios), observável: susceptibilidade magnética Modelo O(4) em 1d (512 sítios), observável: susceptibilidade magnética Análise comparativa de desempenho, modelo O(4) 1d, observável: tempo de correlação da energia

7

5.23	Dinâmica de tempos curtos: comportamento do parâmetro de ordem $<$ L $>$	
	(loop de Polyakov). Em vermelho, regressão utilizando a lei de escala (4.41).	80
5.24	Dinâmica de tempos curtos: comportamento da Auto-Correlação. Em ver-	
	melho, regressão utilizando a lei de escala (4.42)	81
5.25	Dinâmica de tempos curtos: comportamento de < L^2 >. Em vermelho, re-	
	gressão utilizando a lei de escala (4.43)	81
5.26	Potenciais Inter-quarks a temperatura finita. Para $\beta < 6.10$ (i.e. $\rm T < 441$	
	MeV) o potencial é linearmente confinante, para 6.20 < eta < 6.50 (i.e. 449 <	
	$\rm T<474~MeV)$ observamos progressivo enfraquecimento a longas distâncias	
	e para $\beta > 6.50$ quarks e glúons desconfinam-se	83
5.27	Comportamento espacial dos três maiores auto-valores da matriz de corre-	
	lação. Extração do espectro de massas de blindagem — $\beta \equiv \beta_c = 6.50,$	
	rede $50^2 \times 4$, 1M Iterações — pelo ajuste da expressão (4.38) aos dados	
	computacionais.	84
5.28	Comportamento espacial dos três maiores auto-valores da matriz de corre-	
	lação. Extração do espectro de massas de blindagem — $\beta = 6.55 > \beta_c$,	
	rede $50^2 \times 4$, 1M Iterações — pelo ajuste da expressão (4.38) aos dados	
	computacionais.	85
5.29	Comportamento espacial dos três maiores auto-valores da matriz de corre-	
	lação. Extração do espectro de massas de blindagem — $\beta = 7.00 \gg \beta_c$,	
	rede $50^2 \times 4$, 1M Iterações — pelo ajuste da expressão (4.38) aos dados	
	computacionais.	85

Lista de Tabelas

5.1	Análise comparativa de desempenho, modelo $O(4)$ 1d, resultados do ajuste	
	numérico $\tau_{int,E} = a \cdot L^b$ aos resultados computacionais.	68
5.2	Análise comparativa de desempenho, modelo $O(4)$ 1d, resultados do ajuste	
	numérico $\tau_{int,\chi} = a \cdot L^b$ aos resultados computacionais.	69
5.3	Análise de algoritmos: modelo $O(4)$ 1d com campo magnético, observável:	
	energia por spin; 50.000 iterações, 5.000 var reduras iniciais, $\beta=200,$ L = 64.	70
5.4	Análise de algoritmos: modelo $O(4)$ 1d com campo magnético, observável:	
	susceptibilidade magnética; 50.000 iterações, 5.000 var reduras iniciais, $\beta =$	
	200, $L = 64$	70
5.5	Sumário. Primeira e segunda linhas provêm das referências $[27, 40]$ — re-	
	spectivamente: solução exata e simulação de alta-precisão utilizando o algo-	
	ritmo $HB - A$ terceira linha refere-se aos valores obtidos em nossos estudos.	
	Para o caso SU(2) temos θ , z e β/ν : determinação via DTC, γ/ν : determi-	
	nado em equilíbrio térmico.	82
5.6	Massas de blindagem (adimensionais) para o estado fundamental e dois	
	primeiros estados excitados, referentes à teoria de YM tridimensional na	
	fase desconfinada, rede com $50^2 \times 4$ sítios.	86

Sumário

1 Introdução			12		
2	Teorias de Gauge				
	2.1	De Weyl ao modelo padrão	16		
	2.2	QCD: a teoria de gauge das forças fortes	19		
	2.3	Confinamento e a rede euclidiana.	24		
3	A Transição de Desconfinamento				
	3.1	Transições de fase e fenômenos críticos	31		
	3.2	QCD a temperatura finita e o plasma de quarks e glúons	37		
4	\mathbf{Sim}	ulações Numéricas	43		
	4.1	Integração funcional e os métodos de Monte Carlo.	43		
	4.2	Termalização	45		
		4.2.1 Abordagens usuais	45		
		4.2.2 Novas abordagens	50		
	4.3	Estimando erros estatísticos	51		
	4.4	Escala de tamanho finito	53		
	4.5	O método variacional e as massas de blindagem	54		
	4.6	Breve introdução à dinâmica de tempos curtos	56		
5	Resultados das Simulações				
	5.1	Parte I: estudo comparativo de algoritmos	59		
		5.1.1 Análise do Modelo O(4) sem campo magnético	59		
		5.1.2 Análise do Modelo O(4) com campo magnético $\ldots \ldots \ldots \ldots$	69		
		5.1.3 Análise da teoria de gauge de YM SU(2) em 2d \ldots	71		
	5.2	Parte II: desconfinamento na teoria de YM $SU(2)$ em 3d \ldots	73		

	$5.2.1 \\ 5.2.2 \\ 5.2.3 \\ 5.2.4$	A transição de fase	74 76 78 82
	5.2.5	Massas de blindagem	83
6	Conclusão		87
7	7 Apêndices		89
	7.1 O mo	delo O(4) unidimensional	89
	7.2 Teoria	a de YM SU(2) bidimensional \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots	91

Capítulo 1

Introdução

Considero muito possível que a física não possa basear-se no conceito de campo, isto é, em estruturas contínuas. Neste caso, *nada* subsistirá do meu castelo, todo no ar (a teoria da gravitação incluída), nem do resto da física moderna — de A. Einstein a M. Besso, 1954.

Houve notáveis progressos conceituais ao longo do século XX na compreensão das interações fundamentais da natureza [1], o que ficou evidenciado a partir de 1915 com o advento da Relatividade Geral (RG) de Einstein [2] e, posteriormente, nos anos 70, com a construção do Modelo Padrão das partículas elementares [3, 4, 5].

Fundamentada nos princípios da equivalência e covariância geral, que implicam em natural geometrização da interação gravitacional, a RG conduz a previsões em escala cosmológica sem quaisquer precedentes históricos [6]. Já o modelo padrão das partículas elementares (SM), alicerçado em teorias quânticas de campos (TQC) com simetrias locais de gauge [7, 8], permite uma descrição unificada das interações eletromagnéticas e nucleares fracas (via teoria eletrofraca de Weinberg-Glashow-Salam) e classifica elegantemente, por meio da Cromodinâmica Quântica (QCD) [9, 10], o vasto espectro hadrônico — das interações fortes — em famílias bariônicas (e.g. prótons e nêutrons) e mesônicas (e.g. píons, káons e J/ψ).

Entretanto, apesar das exaustivas verificações experimentais de ambos os pilares da física contemporânea, há um certo consenso de que estes modelos matemáticos não são definitivos [11, 12]. Esta crença está vinculada às limitações conceituais que incompatibilizam a formulação da RG como uma teoria quântica de campo [13], e à impossibilidade de deduzir, partindo de primeiros princípios, os parâmetros fundamentais do Modelo Padrão (i.e. massas, cargas e acoplamentos).

Esta filosofia também encontra suporte na evolução histórica dos paradígmas físicos [1], já que estes são quebrados, principalmente, quando modelos teóricos tradicionais são confrontados com novos experimentos em situações-limite. Neste contexto, está a previsão da QCD [14] do desconfinamento de suas cargas de cor, que deve ocorrer quando a matéria hadrônica é submetida a condições extremas de densidade¹ ou temperatura². Nestes regimes, é esperado que os graus de liberdade fundamentais da teoria (i.e. quarks e glúons) — normalmente confinados [15, 16] — sejam libertados por uma transição de fase, originando assim um exótico plasma de quarks e glúons (QGP) [17].

Vale notar que comprovar a hipótese do QGP tem se mostrado um vultoso desafio teórico-experimental [18], pois mesmo dispondo de apropriados dados experimentais [19] resta confrontá-los com previsões teóricas quantitativas. Esta tarefa é particularmente embaraçosa, isto porque, nessas condições extremas a *teoria de perturbações* [10, 20], uma das mais tradicionais ferramentas teóricas, é inaplicável [21]. Atualmente, graças à formulação da QCD na rede euclidiana [16], intensivas simulações numéricas [14, 15, 22] têm constituído a única alternativa teórica.

A discretização do espaço-tempo, característica principal da formulação na rede, cumpre duplo papel: além de um regularizador — que torna bem-definidas as integrais funcionais de Feynman — é também o elemento que mapeia teorias quânticas de campo em modelos de mecânica estatística clássica. Assim, uma série de ferramentas provenientes da mecânica estatística é prontamente agregada aos tradicionais métodos aplicados às TQC. Este é o caso dos métodos de Monte Carlo (MC) [22], das técnicas de escala de tamanho finito (FSS) [23, 24], do grupo de renormalização [25] e da teoria dos fenômenos críticos [26, 27, 28].

Muito embora esse ferramental permita-nos efetuar cálculos essencialmente não-perturbativos, o que representa inegável avanço teórico, devemos considerar que a necessidade de supercomputadores para simulações numéricas de alta precisão impõe certos vínculos operacionais. Portanto, para que máquinas convencionais possam ser empregadas [29], é usual restringir os estudos a situações físicas em que certos efeitos do campo fermiônico e.g. criação e aniquilação de pares virtuais — são desprezados via aproximação quenched.

Assim, também podemos definir um parâmetro de ordem para a transição de desconfinamento, o dito *loop de Polyakov* [14, 30], que está associado à energia livre de um quark infinitamente massivo, sensível portanto à quebra da simetria global discreta Z_3 [o

¹Como as encontradas em estrelas de nêutrons extremamente massivas.

 $^{^2 \}rm Encontradas poucos milis
egundos após o Big-Bang, ou em aceleradores de íons pesados como o RHIC
e LHC.$

centro do grupo de gauge SU(3)]. Esta propriedade permite, segundo argumentos de universalidade [31, 32], o mapeamento da transição de desconfinamento em teorias de gauge SU(N) (quenched) na transição de fase de modelos de spins Z_N , esclarecendo algumas das propriedades universais do QGP [33].

Logo, dada a importância das simulações numéricas para o ramo da QCD a temperatura finita [14] e considerando-se a capacidade computacional disponível, estudamos nesta dissertação a teoria — consideravelmente mais simples — de Yang-Mills SU(2) [34] na aproximação quenched, pois esta também traz consigo os ingredientes fundamentais da QCD ³. Nossas investigações restringiram-se ao caso de 2+1 dimensões, no qual a transição de desconfinamento é de segunda ordem e pertence à mesma classe de universalidade do modelo de Ising bidimensional [31].

Para evidenciar sua relevância histórica, o Capítulo 2 desta dissertação é dedicado a uma breve apresentação das teorias de gauge, visando ilustrar os princípios físicos, assim como as estruturas geométricas e algébricas que nortearam os desenvolvimentos iniciais do tema. Como um exemplo concreto, o formalismo geral da QCD é apresentado e algumas de suas previsões, cruciais no estabelecimento da teoria, são confrontadas com resultados experimentais. Com vistas nas posteriores simulações numéricas, a formulação da QCD na rede euclidiana é construída. Por consistir tarefa não-trivial, apresentamos cuidadosamente a discretização dos campos de gauge (e de matéria). Por fim, definimos um operador invariante de gauge, conhecido por *loop de Wilson*, e mostramos — dentro do contexto da aproximação quenched — a sua relação com o potencial confinante inter-quarks.

A transição de desconfinamento na teoria de Yang-Mills (quenched) é tratada no Capítulo 3. Como esta transição de fase é um fenômeno crítico, dedicamos a primeira seção do capítulo a uma digressão sobre este tópico. Em seguida, o formalismo da QCD a temperatura finita, empregado na investigação da matéria hadrônica em condições extremas, é introduzido e utilizado na dedução do loop de Polyakov. O capítulo termina com uma revisão fenomenológica sobre a busca do QGP, onde enfatizamos a hipótese da supressão do méson J/ψ , devida à blindagem dos potenciais inter-quarks, como um dos possíveis indicativos do desconfinamento de cor.

O método de Monte Carlo, principal técnica computacional utilizada na presente investigação numérica, é desenvolvido no Capítulo 4. Para tal, fazemos uso dos conceitos de cadeias de Markov e ergodicidade, fundamentais para a exata compreensão da evolução temporal no tempo de Monte Carlo (termalização). Considerando que as simulações em

 $^{^3 {\}rm Trata}$ se de uma teoria de gauge não-abeliana para o grupo de Lie ${\rm SU}(2)$ que apresenta transição de desconfinamento a altas temperaturas.

grande escala demandam grande poder computacional, urge a necessidade de alta eficiência no processo de termalização, portanto, apresentamos uma série de algoritmos usualmente empregados e, dentre eles, uma nova proposta, com ganho de desempenho de cerca de 25%[35]. Esse capítulo incorpora ainda duas seções sobre tratamento de erros numéricos. Já que simulações de Monte Carlo sofrem tanto de erros numéricos estatísticos [36] — devido aos algoritmos de termalização — como daqueles provenientes do tamanho finito das redes empregadas (daí a necessidade de técnicas de FSS). A importância destas técnicas é ilustrada com o método do Cumulante de Binder [37], utilizado para determinar a temperatura crítica do sistema, e pela metodologia de extração dos expoentes críticos universais da teoria. São também descritas técnicas de espectroscopia em QCD, para o cálculo das massas de blindagem do campo gluônico, utilizando correlatores invariantes de gauge entre loops de Polyakov — e mostramos que procedimentos de smearing [22], empregados na suavização de ruído, tornam-se fundamentais para a extração das massas de estados excitados (via métodos variacionais [33, 38]). O capítulo é encerrado com uma seção sobre simulações de Dinâmica de Tempos Curtos [39, 40, 41]. Estas são conceitualmente diferentes — e também complementares — ao tradicional método de Monte Carlo no equilíbrio, pois, utilizam-se de médias sobre condições iniciais (em oposição às médias "temporais"). Surge assim a possibilidade da determinação de classes de universalidade dinâmicas.

O Capítulo 5 é sub-dividido em duas partes. Na primeira, mostramos os resultados de nossas simulações numéricas — para o modelo O(4) unidimensional e para a teoria bidimensional de YM SU(2) — que visaram múltiplas análises dos algoritmos de termalização. Na segunda parte, utilizando-nos das supracitadas técnicas numéricas, efetuamos um estudo da transição de desconfinamento propriamente dita. Os gráficos e tabelas compreendidos nesse capítulo foram obtidos como resultado dos programas escritos pelo autor e ilustram os conceitos teóricos previamente desenvolvidos.

No Capítulo 6 sumarizamos os principais resultados das nossas investigações e concluímos com as suas implicações. Há ainda dois apêndices (Capítulo 7) que objetivam majorar a completeza do presente trabalho.

Capítulo 2

Teorias de Gauge

... Gauge invariance has no physical meaning, but must be satisfied for all observable quantities in order to ensure that the arbitrariness of **A** and ϕ does not affect the field strength. Röhrlich, 1965.

2.1 De Weyl ao modelo padrão

Princípios de simetria e invariância tiveram suma importância no desenvolvimento da física contemporânea, como no caso das simetrias de calibre (gauge), que surgiram no século XIX com a eletrodinâmica clássica [42] e, durante o século XX, nortearam a criação das modernas teorias quânticas de campo. Inicialmente, reconhecidas por sua beleza matemática, as transformações de gauge despertaram, em 1919, o interesse do eminente matemático Hermann Weyl [7]. Como profundo conhecedor da geometria diferencial e da teoria dos grupos de Lie, Weyl iniciou (o primeiro) programa de unificação da gravitação einsteniana [2] e do eletromagnetismo de Maxwell.

Sua observação crucial foi que a *conexão afim*¹, sob mudanças de coordenadas, transforma-se analogamente a um potencial-vetor eletromagnético (submetido a transformações de gauge) [7], conduzindo Weyl à idéia de que todas as interações fundamentais conhecidas até então constituiriam diferentes manifestações de uma única estrutura geométrica subjacente. Para implementar sua idéia, Weyl propôs novas famílias de conexões, que deveriam ser invariantes por transformações locais de escala — i.e. uma espécie de gauge geométrico a fim de obter, em algum limite físico, a almejada interação eletro-gravitacional.

 $^{^1 {\}rm Entidade}$ geométrica que define o paralelismo nos espaços-tempos curvos (Riemannianos) da RG. Por isso, é também denominada de transportador paralelo.

CAPÍTULO 2. TEORIAS DE GAUGE

Apesar de matematicamente consistente, o formalismo contruído por Weyl carecia de realidade física, isto porque as transformações de escala — responsáveis pela pretensa unificação — eram incompatíveis com a existência de um comprimento característico, como por exemplo, o comprimento de onda Compton (i.e. \hbar/mc), que surge no contexto da mecânica dos quanta. De certa forma, estas limitações trouxeram à cena uma intrigante hipótese: transformações de gauge poderiam agir sobre entidades não-mensuráveis, como a fase das funções de onda da matéria, não implicando em contradições físicas.

A relevância destas observações não é evidente nos domínios da física clássica, em contraste com o seu contexto na mecância quântica. Afinal, devido ao acoplamento mínimo (i.e. $\overrightarrow{p} \rightarrow \overrightarrow{p} - ie\overrightarrow{A}$), a fase da função de onda ψ de uma partícula carregada na presença do potencial-vetor eletromagnético A_{μ} modifica-se como

$$\psi \to \psi e^{-iq\Lambda(r,t)},$$
(2.1)

graças a transformações locais de gauge $\Lambda(r,t)$ — do grupo de Lie U(1) — que deixam (classicamente) os campos **E** e **B** invariantes. Notemos ainda que, fixando localmente a fase de qualquer função de onda, também o fazemos globalmente [7], haja vista que o potencial-vetor agirá — em estrita analogia geométrica com a conexão de Weyl — como um transportador paralelo da fase.

A forma sutil com que geometria² e transformações de gauge são unificadas pela mecânica quântica fez com que suas profundas repercursões tardassem a surgir. Posteriores desenvolvimentos datam de 1935, quando Hideki Yukawa propôs um mecanismo para explicar as interações nucleares, segundo um modelo em que estas forças seriam intermediadas por um novo tipo de quanta, o píon (um análogo massivo do fóton eletromagnético). Como o potencial nuclear é de curto alcance — usualmente $V = \frac{\exp(-Mcr/\hbar)}{r}$ — Yukawa propôs uma massa de cerca de 200 MeV para a nova partícula, sendo portanto passível de verificação experimental [1].

No mesmo período, descobriu-se experimentalmente que as forças nucleares são independentes da carga eletromagnética [1]. Assim, Werner Heisenberg propôs que prótons e nêutrons poderiam ser descritos como dois estados distintos de uma só partícula: o núcleon. Logo, a força nuclear deveria ser produzida pela presença de *cargas nucleares* (ditas spin isotópico), fontes dos mediadores de Yukawa.

Nos anos 50, considerando os sucessos da eletrodinâmica quântica (QED), apresentavamse todos os gérmens necessários à aplicação de um princípio de invariância de gauge para

²No sentido do espaço interno dos grupos de Lie.

as forças nucleares. Portanto, em 1954, C. N. Yang e R. Mills [34] (YM) formalizaram uma elegante generalização do eletromagnetismo, substituindo o grupo de gauge U(1) por uma extensão não-abeliana: SU(2). A simetria interna desta teoria — assim referida para contrastá-la às usuais simetrias espaço-temporais — implica em certas leis de conservação para o spin isotópico, matematicamente, semelhantes àquelas para o momento angular.

A principal consequência fenomenológica deste modelo é que o tripleto de píons (π^0 , π^+ , π^-) foi identificado com os respectivos geradores de SU(2). Já o dubleto nuclear (p, n) foi associado aos dois possíveis estados (up, down) de um espinor, sobre os quais age o grupo. Tipicamente, como os geradores de SU(2) são matrizes de Pauli, transformações de gauge nesta teoria induzem *rotações no espaço interno* das funções de onda nucleônicas [8], permitindo portanto a transformação de prótons em nêutrons e vice-versa, pela apropriada troca de mésons.

No entanto, a existência de mediadores massivos não podia ser realizada na teoria de YM. Isto porque mediadores explicitamente massivos devem ser matematicamente descritos, na densidade lagrangiana da teoria, como $m^2 A^c_{\mu} A^{\mu}_c$ — aqui A^c_{μ} é o potencial-vetor generalizado em SU(2) — o que, infelizmente, destrói a invariância de gauge do modelo.

Assim, o prognóstico físico para as teorias de gauge permaneceu desolador durante quase duas décadas, até que nos anos 70, graças a uma fortuita série de descobertas teóricas, ocorreram radicais mudanças neste quadro. Um exemplo é a demonstração de que teorias de campo não-abelianas, como YM, podem ser renormalizadas perturbativamente — devido à propriedade de liberdade assintótica [10, 43] — o que produziu avanços teóricos, na compreensão das partículas elementares, nunca antes vislumbrados.

Dentre eles está a unificação eletrofraca, na qual as interações eletromagnéticas e nucleares fracas foram fundidas em uma só teoria de gauge, cuja simetria $SU(2) \otimes U(1)$ é espontaneamente quebrada pelo mecanismo de Higgs [43], realizando assim a velha aspiração de Yang e Mills: a obtenção de mediadores massivos de curto alcance. Já as forças-nucleares fortes puderam ser apropriadamente descritas quando, em 1973, a teoria de Yang e Mills foi generalizada para o grupo de gauge SU(3), originando uma nova dinâmica quântica, atuante sobre partículas (subnucleares) dotadas de *cargas de cor*, daí o seu nome: Cromodinâmica Quântica (QCD).

Conjuntamente, a teoria eletrofraca e a QCD formam o que se convencionou chamar de o *Modelo Padrão das Partículas Elementares*, que contém em si o arcabouço teórico com que são descritos fenômenos naturais em escalas tão microscópicas como 10^{-16} metros.

2.2 QCD: a teoria de gauge das forças fortes

Os primeiros marcos na edificação da física nuclear deram-se em 1919, com a descoberta do próton [1], no célebre experimento de Rutherford do espalhamento de partículas α , e em 1920 com a sua conjectura sobre a existência do nêutron (detectado, posteriormente, por James Chadwick em 1932). Mas, a coexistência dessas duas espécies de partículas, em uma diminuta região do espaço, colocava em cheque a estabilidade eletromagnética do núcleo atômico, o que indicava a existência de uma nova força da natureza, a força (nuclear) forte.

Durante os quase 40 anos que se seguiram à descoberta do nêutron, centenas de outras partículas foram descobertas pelo progressivo uso de aceleradores de partículas [3]. De fato, este espectro de partículas *elementares* tornara-se tão vasto que, físicos como Geoffrey Chew, em 1962, questionando-se sobre conceitos de elementariedade no mundo subatômico, criaram exóticos esquemas de classificação, como o bootstrap³.

Nesse momento histórico a teoria dos grupos de Lie apareceu na física de partículas, pois por meio dela era possível justificar as regularidades experimentalmente encontradas. Inicialmente, não se adotaram mecanismos dinâmicos e sim modelos estáticos, como o modelo estático de quarks proposto por Gell-Mann e Zweig [3]. Em particular, com esta abordagem, a interação hadrônica (i.e. nuclear-forte) pôde ser bastante simplificada, introduzindo-se apenas um novo postulado, a existência de três tipos — ditos sabores — de partículas subnucleares, dotadas de cargas elétricas fracionárias, que receberam o inusitado nome de quarks — up (u), down (d) e strange (s). Com esta hipótese tornava-se natural interpretar o espectro de partículas hadrônicas como estados ligados, ou seja, pares de quark e antiquark ou trios de quarks — que originariam, respectivamente, mésons e bárions — com simetrias ditadas pela teoria de grupos.

A confirmação indireta da existência dos quarks entrou em cena com o advento dos experimentos de espalhamento inelástico profundo (DIS) [3, 4], realizados em aceleradores lineares. Nestes experimentos, elétrons altamente energéticos eram lançados contra prótonsalvo, produzindo uma série de novos hádrons. Mas, apesar das distribuições angulares das partículas resultantes serem compatíveis com a existência de quarks puntiformes⁴, vagando livremente no interior dos prótons, nenhum deles fora diretamente detectado.

Portanto, os experimentos de DIS configuravam um enigma, já que este *confinamento* nuclear deveria ser explicado por uma teoria de natureza dinâmica, que contivesse em algum limite — o bem-verificado modelo estático de quarks. Algumas abordagens

 $^{^{3}\}mathrm{Em}$ que cada espécie de partícula elementar é composta, e compõe, todas as outras.

⁴Também denominados como *pártons*: partes do próton.

fenomenológicas foram esboçadas, como no caso dos *modelos de sacola* e *da corda*, que em aproximação semi-clássica, usando potenciais inter-quarks como

$$V_{q\overline{q}}\left(r\right) = \frac{\alpha}{r} + \sigma r,\tag{2.2}$$

previam o confinamento, a liberdade para pequenas separações inter-quarks, além de reproduzirem o espectro das massas de mésons pesados [3].

Mas, claramente, estes modelos necessitavam de apropriada fundamentação, o que foi apontado com a descoberta de certos estados ligados de quarks — e.g. $\Delta^{++} \equiv (u \uparrow u \uparrow u \uparrow)$ — que apresentavam aparentes violações do princípio de exclusão de Pauli [3]. Para contornar este problema era preciso diferenciar os três sabores de quarks. Cunhou-se então um novo número quântico: as *cargas de cor* (usualmente ditas verdes, vermelhas e azuis), de cuja interação deveria, supostamente, surgir a força forte.

Em 1973 foi construído o atual formalismo para a descrição das interações entre cargas de cor. Tratava-se da Cromodinâmica Quântica[10], cujas raízes provêm da extensão da teoria de gauge de Yang-Mills para o grupo de gauge SU(3) [8]. Na QCD, os 8 geradores de SU(3) são associados a partículas mediadoras bosônicas, que transportam simultaneamente um par de cor e anti-cor — os glúons — cuja ação sobre os campos coloridos de matéria (i.e. de quarks) é representada pelas rotações de espinores complexos, em analogia às rotações do spin isotópico do formalismo de YM SU(2).

A QCD respeita as invariâncias relativística e de gauge, através da seguinte densidade lagrangiana

$$\mathcal{L}_{QCD} = -\frac{1}{4} \sum_{a=1}^{8} F^{a\mu\nu} F^{a}_{\mu\nu} + \sum_{j=1}^{n_f} \overline{\psi_j} \left(i\gamma^{\mu} D_{\mu} - m_j \right) \psi_j, \qquad (2.3)$$

cujo primeiro termo descreve a interação — não-trivial — dos campos de gauge⁵ e cujo segundo termo descreve a evolução dos campos de matéria — ψ_j representa campos massivos (m_j) de Dirac para n_f diferentes sabores de quarks (u, d, c, s, t, b) . Já o termo γ^{μ} denota matrizes de Dirac [9], que podem ser expressas em termos das bem conhecidas matrizes de Pauli como

$$\gamma_j = \begin{bmatrix} 0 & -i\sigma_j \\ i\sigma_j & 0 \end{bmatrix}, \quad \gamma_4 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$
(2.4)

 $^{^5 \}rm Note$ que as somas sobre os índices gregos de espaço-tempo são implícitas, mas a soma sobre os índices latinos de cor é explícitada.

CAPÍTULO 2. TEORIAS DE GAUGE

Vale notar que o acoplamento mínimo, responsável pela interação entre ambos os termos da lagrangiana, é introduzido valendo-se da derivada covariante, D_{μ} definida por

$$D_{\mu} = \partial_{\mu} - ie_s \mathbf{A}_{\mu}, \tag{2.5}$$

sendo e_s a carga de cor, com a qual é definido o acoplamento de gauge da QCD

$$\alpha_s = \frac{e_s^2}{4\pi}.\tag{2.6}$$

Mas, ao contrário da QED, a QCD é uma teoria não-abeliana. Logo, os seus bósons mediadores possuem cargas de cor, sofrendo assim auto-interação. Para vê-lo, observemos que o campo de glúon é escrito como $\mathbf{A}_{\mu} = \sum_{a} t^{a} A^{a}_{\mu}$, onde A^{a}_{μ} (com a = 1...8) são as componentes de cor dos campos de glúon. Os t^{a} são os geradores do grupo SU(3), em sua representação fundamental [44], tais que $[t^{a}, t^{b}] = iC_{abc}t^{c}$, com C_{abc} constantes de estrutura do grupo (normalizadas como $Tr [t^{a}t^{b}] = \frac{\delta^{ab}}{2}$). Então, o tensor de campo gluônico é definido em termos das derivadas como

$$F^{a}_{\mu\nu} = \left[D^{a}_{\mu}, D^{a}_{\nu}\right] = \partial_{\mu}A^{a}_{\nu} - \partial_{\nu}A^{a}_{\mu} - e_{s}C_{abc}A^{b}_{\mu}A^{c}_{\nu}.$$
(2.7)

A teoria resultante é invariante sob transformações locais de gauge, ou seja, sendo $\Lambda = \Lambda(\overrightarrow{r}, t)$ uma quantidade que assume valores em SU(3) e transforma os A_{μ} e $F_{\mu\nu}$ como

$$A'_{\mu} = \Lambda A_{\mu} \Lambda^{-1} - \frac{1}{ie_s} \left(\partial_{\mu} \Lambda \right) \Lambda^{-1}, \qquad (2.8)$$

$$F'_{\mu\nu} = \Lambda F_{\mu\nu} \Lambda^{-1}, \qquad (2.9)$$

a densidade lagrangiana preserva sua forma funcional sob estas transformações.

Ainda em estrita analogia ao eletromagnetismo as equações de Euler-Lagrange [20] podem ser aplicadas. Nesse caso os A^{μ} desempenham o papel de variáveis independentes, de onde são obtidas as equações de movimento para os campos clássicos. Essas equações são uma generalização não-abeliana da eletrodinâmica. A saber [7]

$$D^{\mu}F_{\mu\nu} = \partial^{\mu}F_{\mu\nu} - ie_{s}\left[A^{\mu}, F^{\mu\nu}\right] = j_{\nu}, \qquad (2.10)$$

é o correspondente não-abeliano da equação tensorial, que no eletromagnetismo clássico [42] resulta na divergência de **E** e no rotacional de **B**. O mais notável é que a corrente j_{ν} é uma combinação linear dos $(j_{\nu})^k = e_s \overline{\psi} \gamma_{\nu} t^k \psi$, com t^k geradores do grupo SU(3). Portanto, a corrente também é um operador, tendo uma direção no espaço interno.

Por outro lado, existe um outro conjunto de equações, conhecidas por identidades de Bianchi, que não provêm do princípio de mínima ação, mas sim das simetrias espaçotemporais do tensor $F_{\mu\nu}$

$$D_{\mu}F_{\nu\lambda} + D_{\lambda}F_{\mu\nu} + D_{\nu}F_{\lambda\mu} = 0, \qquad (2.11)$$

por sua vez, essas equações corresponderiam, no caso maxwelliano, à divergência de \mathbf{B} e ao rotacional de \mathbf{E} .

Já a contraparte quântica das teorias de gauge não-abelianas é obtida pelo método de Feynman, com o qual é possível calcular os valores esperados de operadores de campo e.g. via teoria de perturbação — que transportam informações físicas sobre o sistema. Para a QCD os valores médios dos observáveis — e.g $O(A_{\mu}, \psi, \overline{\psi})$ — podem, em princípio, ser calculados mediante a seguinte expressão

$$\langle O(A_{\mu},\psi,\overline{\psi})\rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\mathbf{A}_{\mu} D\psi D\overline{\psi}O(A_{\mu},\psi,\overline{\psi})e^{iS},$$
 (2.12)

onde

$$Z = \int \mathcal{D}\mathbf{A}_{\mu} \mathcal{D}\psi D\overline{\psi} e^{iS}$$
(2.13)

é o gerador funcional, que se expressa em termos da ação $S = \int d^4x \mathcal{L}_{QCD}$.

Uma vez quantizada, a QCD permite que sejam feitas notáveis previsões experimentais. Talvez a principal delas seja a "Liberdade Assintótica" [4, 10], que garante a consistência da teoria de perturbação em processos a altas energias. Essa propriedade é dedutível de análises rigorosas, via grupo de renormalização, e mostra que a força forte torna-se progressivamente mais fraca à medida que os quarks interagentes são aproximados, justificando portanto diversos modelos fenomenológicos [3].

A liberdade assintótica também guarda estrita relação com o comportamento da "constante" de acoplamento da QCD (2.6), que depende drasticamente da escala de momentos $|q^2|$, haja vista seu comportamento

$$\alpha_{S}\left(\left|q^{2}\right|\right) = \frac{12\pi}{\left(11N_{c} - 2N_{f}\right)\ln\left(\left|q^{2}\right|/\Lambda^{2}\right)},$$
(2.14)

onde N_c e N_f são, respectivamente, o número de cores e de sabores presentes, enquanto o fator de escala Λ — que emerge espontaneamente na quantização da teoria — é compreen-

CAPÍTULO 2. TEORIAS DE GAUGE

dido no intevalo $100 MeV < \Lambda c < 500 MeV$.

O suporte experimental que inicialmente confirmou a QCD era devido a processos a altos momentos, nos quais diversas técnicas analíticas (desenvolvidas nos anos 40 e 50 para uso na QED) podiam ser empregadas. Por exemplo, citamos a determinação do número de cargas de cor presentes na teoria, que é calculável pelas taxas de transição em processos de produção de hádrons por colisões leptônicas (e.g. elétron-pósitron), neste caso a taxa medida é dada por

$$R = \frac{\sigma(e^+e^- \to hadrons)}{\sigma(e^+e^- \to \mu^+\mu^-)},\tag{2.15}$$

o que resulta em uma soma (com termos proporcionais ao quadrado da carga elétrica Q_e^2) de quarks e anti-quarks $(q\bar{q})$. Considerando os sabores u, c, d, s, b (e suas respectivas cargas elétricas fracionárias) tem-se $R \cong N_C \frac{11}{9}$ [9], o que experimentalmente indica $N_C = 3$.



Figura 2.1: Decaimentos lépton-hádron e a determinação do número de cargas de cor [3]

Existem ainda outras previsões perturbativas, como correções quânticas para as funções de escala (para quarks pontuais), que são experimentalmente verificáveis nos DIS. Estas correções são conhecidas como violação de escala de Bjorken [22], sendo produzidas pela sub-estrutura (virtual) que emerge da interação entre glúons e quarks. Atualmente, a QCD é a única teoria capaz de prever de forma natural este tipo de correções, indicando portanto um considerável triunfo teórico.



Figura 2.2: Diagrama de Feynman para o espalhamento inelástico profundo (DIS). Ref. [3]

Persiste entretanto um problema técnico: a forma funcional de (2.14) remete a uma quebra na teoria de perturbações (em séries de potências de α_S) para os regimes de baixos momentos. Isto implica a impossibilidade de demonstrar analiticamente o fenômeno de confinamento. Daí a necessidade de desenvolver técnicas não-perturbativas de cálculo que permitam decidir se a QCD pode realmente acomodar a não-observação de quarks e glúons isolados.

2.3 Confinamento e a rede euclidiana.

Como vimos na seção anterior, devido às peculiaridades da QCD em certos regimes, fazem-se necessárias abordagens não-perturbativas para o cálculo de observáveis. Uma das possíveis alternativas é oferecida pela formulação da QCD na rede Euclidiana [22, 25], que permite uma rigorosa definição matemática da teoria, além de descortinar a possibilidade de cálculos numéricos.

Usualmente, o método de discretização utilizado na construção da rede euclidiana consiste na partição do espaço-tempo em $N_S^3 \times N_T$ células hipercúbicas de lado a, o que induz uma substituição de derivadas parciais por diferenças finitas e de integrais por somas. Todavia, a aplicação deste procedimento produz quebra da invariância de gauge da teoria, indicando portanto, a necessidade da adoção de reformulações (no discreto) da ação original, que preservem a invariância de gauge e recuperem, para $a \to 0$, a ação da QCD no contínuo.

A formulação de Wilson [16] permite alcançar parcialmente o objetivo proposto, uma vez que este esquema lida apenas com o primeiro termo da lagrangiana (2.3), originando assim a ação para a interação entre glúons. Os elementos essenciais dessa abordagem são conhecidos por *variáveis de link (ou elos)* e consistem em representações do grupo SU(3) que habitam cada aresta da rede. Se denotarmos por **P** a ordenação temporal e por $\hat{\mu}$ um versor que parte do sítio x da rede, podemos escrever a variável de elo $U_{\mu}(x)$ em termos dos campos gluônicos $A_{\mu}(x)$ como

$$U_{\mu}\left(x\right) = \mathbf{P}e^{ie_{s}a\cdot\int_{x}^{x+\mu a}dx^{\mu}\mathbf{A}_{\mu}\left(x\right)}.$$
(2.16)

A interpretação geométrica para os elos (2.16) é bastante interessante, pois além de serem elementos de SU(3), os elos também agem como os transportadores paralelos que propiciam o deslocamento espacial dos campos gluônicos. Estas propriedades sugerem que as quantidades invariantes, necessárias à construção da almejada ação, possam ser obtidas do produto de elos ao longo de trajetórias fechadas. Por exemplo, tomando o produto ordenado dos 4 elos de um quadrado elementar, obtemos a *plaqueta*



Figura 2.3: Plaqueta: produto ordenado dos elos ao longo de uma célula elementar da rede. Ref. [22].

O traço desta quantidade, segundo a teoria dos grupos [8], fornece um invariante de gauge que serve aos nossos propósitos. Haja vista que as transformações de gauge (na rede) [22] dos elos

$$U_{\mu}(x) \to g(x) U_{\mu}(x) g^{-1}(x + \hat{\mu}a),$$
 (2.18)

são geradas pelos elementos g(x) de SU(3), não alteram o valor do traço de (2.17) e recaem em (2.8) no limite do contínuo [25].

Portanto, segundo a abordagem de Wilson [16], podemos construir uma ação discretizada para campos de gauge — para quaisquer teorias à la YM com grupos SU(N)

CAPÍTULO 2. TEORIAS DE GAUGE

e em d-dimensões — utilizando a seguinte definição

$$S_{GW}[U] \equiv \frac{\beta}{2} \sum_{x} \sum_{\mu,\nu=1}^{d} \left\{ 1 - \frac{1}{N} Re(TrP_{\mu\nu}) \right\}, \qquad (2.19)$$

que apresenta todas as propriedades requeridas. Para verificá-lo [25], notemos que ao considerar deslocamentos infinitesimais em (2.16), temos em boa aproximação

$$U_{\mu}(x) = e^{ie_s a A_{\mu}(x)} \simeq 1 + ie_s a A_{\mu}(x) + \dots, \qquad (2.20)$$

assim com

$$A_{\mu}\left(x+a\hat{\nu}\right) \simeq A_{\mu}\left(x\right)+a\Delta_{\nu}A_{\mu}\left(x\right).$$

$$(2.21)$$

Portanto, substituindo (2.20) e (2.21) em (2.17), e considerando a relação de Baker-Campbell-Hausdorff $e^{x}e^{y} = e^{x+y+[x,y]+\dots}$, pode-se mostrar [25] que

$$P_{\mu\nu} \simeq \mathbf{1} + ia^2 e_s F_{\mu\nu} - a^4 e_s^2 F_{\mu\nu} F_{\mu\nu} + O(e_s^3), \qquad (2.22)$$

onde, $F_{\mu\nu} = \Delta_{\mu}A_{\nu}(x) - \Delta_{\nu}A_{\mu}(x) + [A_{\mu}(x), A_{\nu}(x)].$

Assim, substituindo (2.22) em (2.19) e utilizando $\beta = 2N \cdot (e_s^2 a^{4-d})^{-1}$, obtemos (no contínuo euclidiano) a ação gluônica ao tomarmos (conjuntamente) os limites $a \to 0$ e $N_S^3 \times N_T \to \infty$.

Portanto, emerge assim uma situação bastante sutil: o limite do contínuo deve processarse como um fenômeno crítico, ajustado pela constante de acoplamento da ação (2.19) sendo o ponto crítico dado por $\beta \to \infty$ (i.e. $e_s^2 \to 0$). Esperamos obter uma transição de fase de segunda ordem em relação ao parâmetro β , cuja conseqüência é uma transformação suave entre o regime no discreto (onde invariâncias translacionais e rotacionais estão quebradas) e o regime do contínuo (onde tais simetrias são restauradas). Como exemplo, por meio de técnicas do grupo de renormalização [22], observamos que no caso quadridimensional o espaçamento de rede a relaciona-se à constante de acoplamento nua e_s por meio de

$$a = \frac{1}{\Lambda} e^{-1/(2e_S^2\beta_0)},$$
 (2.23)

onde β_0 (adimensional) e Λ (com dimensão de massa) são constantes de integração.

Resta-nos contudo, definir um tratamento apropriado para os campos de matéria. Este

é o ponto mais sensível da abordagem na rede, já que mesmo após vários anos de intensa investigação, não há uma implementação que seja plenamente satisfatória [25]. O principal problema conceitual surge quando tentamos discretizar a ação de Dirac, que descreve os campos ψ dos quarks submetidos ao acoplamento mínimo

$$S_{Dirac} = \int d^4 x \overline{\psi} \left(i \gamma^{\mu} D_{\mu} - m \right) \psi, \qquad (2.24)$$

utilizando apenas as substituições

$$\frac{\partial \psi(\overrightarrow{x})}{\partial x^k} \to \frac{\left[\psi(\overrightarrow{x}+\hat{k})-\psi(\overrightarrow{x})\right]}{a}, \quad \int d^4x \to \sum_x a^4.$$

Infelizmente, a ação resultante apresenta um grande inconveniente, o número de sabores de férmions é duplicado para cada dimensão do espaço, o que impede que tenhamos um limite do contínuo fisicamente razoável. Uma das soluções, aventada por Wilson [25], consiste na adição de certos contra-termos à ação discretizada, o que elimina artificialmente a existência destas indesejadas duplicações. Assim, Wilson propôs a seguinte ação

$$S_{QW}\left(U,\psi,\overline{\psi}\right) = \sum_{xy} \left(\overline{\psi}_{y}Q\left[U\right]_{yx}\psi_{x}\right),$$

$$Q\left[U\right]_{yx} = \delta_{yx} - \kappa \sum_{\mu} \delta_{y,x+\hat{\mu}} \left(1+\gamma^{\mu}\right) U_{\mu}\left(x\right),$$
(2.25)

onde $\kappa = \frac{1}{2am+8}$ é o parâmetro de hopping, expresso em termos do espaçamento de rede a e da massa m do quark. Apesar de apresentar efeitos de discretização relativamente severos esta formulação para férmions é ainda a mais usada em simulações da QCD na rede.

A última etapa da formulação da QCD na rede euclidiana é alcançada ao formalizarmos o processo de quantização por meio de integrais de Feynman. Aqui, a rede euclidiana tem a propriedade de permitir uma rigorosa definição das medidas invariantes, essenciais às integrais funcionais, já que consiste em um regularizador não-perturbativo.

Nesse formalismo, a principal quantidade resultante da quantização é a versão euclidiana do funcional gerador (2.13), também conhecida como $função \ de \ partição$

$$Z = \int DUD\psi D\overline{\psi}e^{-S\left[U,\psi,\overline{\psi}\right]},\tag{2.26}$$

cujas medidas invariantes DU (de Haar) e $D\psi D\overline{\psi}$ são definidas, na rede (i.e. com x = na, $n \in \mathbb{N}$), como

$$DU = \prod_{n=1}^{\infty} \prod_{\mu=1}^{4} dU_{\mu}(na), \qquad (2.27)$$

$$D\psi D\overline{\psi} = \prod_{a=1}^{n_f} \prod_{n=1}^{\infty} \prod_{\alpha}^{4} d\psi_{\alpha}^a(na) \prod_{b=1}^{n_f} \prod_{n=1}^{\infty} \prod_{\beta}^{4} d\overline{\psi}_{\beta}^b(na).$$
(2.28)

Em analogia ao caso (2.12) os valores médios assumidos pelos observáveis físicos $O(U, \psi, \overline{\psi})$ podem ser calculados, em estrita semelhança formal à mecânica estatística, por meio da seguinte expressão

$$\langle O(U,\psi,\overline{\psi})\rangle = \frac{1}{Z}\int DUD\psi D\overline{\psi}O(U,\psi,\overline{\psi})e^{-S}.$$
 (2.29)

Finalmente, devemos mencionar que a parte fermiônica da expressão acima é bilinear nos campos de matéria, o que a torna exatamente integrável — usando cálculo de Grassmann [22] — assim, a expressão para a função de partição (2.26) pode ser finalmente dada por

$$Z = \int [DU] e^{-S[U]} det (Q[U]), \qquad (2.30)$$

onde det(Q[U]) denota o determinante não-local da matriz Q[U] definida em (2.25). Para uma simplificação ulterior, afirmamos que há indícios experimentais [25] apontando que em certos regimes (e.g. ao considerarem-se apenas quarks com massas elevadas) os *loops* $de quarks^6$ — descritos por det(Q[U]) — tornam-se pouco relevantes. Esta é a motivação para a aproximação quenched, na qual tomamos $\kappa \to 0$ em (2.25) a fim de obtermos det(Q[U]) = constante.

Tendo concluído a construção da QCD sobre a rede euclidiana, retornemos à nossa motivação original, ou seja, computar quantidades inacessíveis à usual teoria de perturbações. Em particular, o estudo de estados ligados do tipo quark-antiquark nos é de grande valia, haja vista que trata-se de um problema-modelo para o confinamento, cujo espectro experimental (i.e. de mésons) é bem conhecido.

Portanto, tomemos como exemplo [22] o estado (invariante por transformações de gauge)

$$|\Psi_{\alpha\beta}(|\overrightarrow{x}-\overrightarrow{y}|,it=0)\rangle = \psi_{\alpha}(\overrightarrow{x},0)U(\overrightarrow{x},0,\overrightarrow{y},0)\overline{\psi}_{\beta}(\overrightarrow{y},0)|\Omega\rangle, \qquad (2.31)$$

⁶Terminologia que denota a geração de pares virtuais de quark-antiquark a partir do campo de glúons.

definido em termos do estado fundamental $|\Omega\rangle$, do transportador paralelo

$$U(\overrightarrow{x}, 0, \overrightarrow{y}, 0) = e^{ie\int \overrightarrow{y} dz^i A_i(\overrightarrow{z}, t)}, \qquad (2.32)$$

e das funções-de-onda $\psi_{\alpha}(\vec{x},0)$ e $\overline{\psi_{\beta}}(\vec{y},0)$ que representam, respectivamente, um quark e um antiquark localizados em $(\vec{x},0)$ e $(\vec{y},0)$. Dado que a propagação deste estado, no tempo imaginário, é descrita pela função de correlação $G\left(\vec{x}',\vec{y}',\tau,\vec{x},\vec{y},0,\right)$, definida como

$$G\left(\overrightarrow{x}', \overrightarrow{y}, \tau, \overrightarrow{x}, \overrightarrow{y}, 0, \right) = \langle \Psi\left(|\overrightarrow{x} - \overrightarrow{y}|, it = \tau\right)| \Psi\left(|\overrightarrow{x} - \overrightarrow{y}|, it = 0\right)\rangle, \qquad (2.33)$$

podemos extrair o espectro de energias deste sistema por meio da análise dos modos de decaimento de (2.33).

No caso em que a aproximação *quenched* é utilizada, considerando um par de quarks estáticos infinitamente massivos⁷, foi demonstrado por Wilson que o cálculo da função de correlação fica simplificado para

$$G\left(\overrightarrow{x}, \overrightarrow{y}, \tau, \overrightarrow{x}, \overrightarrow{y}, 0, \right)_{Mq, M\bar{q} \to \infty} \propto \left\langle e^{ie \oint dz^{\mu} A_{\mu}(z)} \right\rangle \equiv W\left[A\right], \qquad (2.34)$$

onde W[A] é uma grandeza invariante de gauge, denominada *loop de Wilson*, que pode ser escrita em termos de (2.16) como

$$W[A] = Tr\left[\prod_{l \in C} U_l\right],\tag{2.35}$$

por meio do contorno retângular C de integração com vértices em $(\vec{x}, 0), (\vec{y}, 0), (\vec{x}, \tau)$ e (\vec{y}, τ) .

⁷O que é fisicamente aceitável para mésons pesados como $c\bar{c}$ ou $b\bar{b}$.



Figura 2.4: O loop de Wilson. Ref. [22].

O loop de Wilson guarda portanto [16] intrínseca relação com o potencial estático entre um par quark-antiquark separado por uma distância $R = |\vec{x} - \vec{y}|$, o que é expresso pela relação

$$V(R) = -\lim_{T \to \infty} \frac{1}{T} \ln \left(W[A] \right).$$
(2.36)

Logo, a demonstração de que esta grandeza apresenta crescimento proporcional à distância R, para $R \to \infty$, configuraria clara evidência do fenômeno de confinamento.

De fato, quando o parâmetro β de (2.19) é pequeno, pode-se mostrar — por expansão de acoplamento forte [16] — que W[A] respeita a *lei de área* [25], implicando um potencial (2.36) com comportamento linear

$$V(R) = \sigma R, \tag{2.37}$$

em que a constante σ , em analogia a (2.2), é conhecida como tensão de corda. Por outro lado, para efetuar o mesmo cálculo no regime de $\beta \to \infty$ — i.e. o limite do contínuo — fazem-se necessárias sofisticadas técnicas numéricas.

Capítulo 3

A Transição de Desconfinamento

Some things have to be believed to be seen — Ralph Hodgson.

3.1 Transições de fase e fenômenos críticos

Esta seção destinada-se a uma breve revisão da teoria clássica das transições de fase, em especial às transições de segunda ordem, já que dentre os fenômenos críticos a elas associados, deve estar a transição de desconfinamento da QCD. Como guias heurísticos utilizamos alguns exemplos cotidianos [27, 26, 28], como as transições líquido-gás e magneto-paramagneto, antevendo assim a introdução dos conceitos que, posteriormente, aplicaremos na análise dos dados gerados por nossas simulações numéricas.

De forma sintética podemos dizer que o comportamento termodinâmico de um sistema físico é sumarizado pelos seus diagramas de fases. Estes diagramas, por sua vez, constituem a representação geométrica — em geral, apresentados como projeções bidimensionais — de uma certa relação funcional, chamada equação de estado, que é construída a partir de alguns poucos parâmetros termodinâmicos relevantes à descrição macroscópica do sistema (e.g. Pressão: p, Densidade: ρ e Temperatura: T).

Um exemplo clássico é o diagrama P-T (representação gráfica no plano Pressão vs. Temperatura) de uma substância como a água. Nesse diagrama constatamos a presença de linhas contínuas que delimitam a coexistência das fases sólida e gasosa (*linha de sublimação*), sólida e líquida (*linha de fusão*) e líquida e gasosa (*linha de pressão de vapor*). Observamos ainda certos pontos de intersecção, como o *ponto triplo*, que reflete a coexistência das três fases. Matematicamente, as linhas de coexistência denotam descontinuidades do funcional de estado, ou seja, ao cruzá-las certas propriedades físicas do sistema em questão — e.g. calor específico ou densidade — sofrem abrupta mudança, caracterizando uma transição de fase dita de primeira ordem.

Contudo, são as regiões críticas, assinaladas pela presença de pontos críticos — como os delimitadores do final das curvas de coexistência — que apresentam a fenomenologia de mais acentuada sutileza. Isso porque, nos estritos arredores de tais regiões a distinção entre fases contíguas é suavizada, desaparecendo por fim quando o ponto crítico é alcançado. Nesse caso, os funcionais de estado do sistema não apresentam descontinuidades — muito embora suas primeiras derivadas possam apresentá-las. Assim, é usual denominá-las como transições de fase de segunda ordem.



Figura 3.1: À esquerda, diagrama P-T ilustrando transições sólido-líquido-gás. À direita, diagrama H-T ilustrando transições magneto-paramagneto. Ref. [27].

Ressaltamos também que em certos sistemas a definição de um parâmetro de ordem, como a diferença de densidades entre a fase líquida e a gasosa da água (i.e. $\rho_{Lquido} - \rho_{Gs}$), simplifica consideravelmente a caracterização da transição. Haja vista que este parâmetro assume valores bem definidos — não-nulo em uma das fases e nulo na outra — sendo seu modo de variação um determinante da ordem da transição (i.e. variação contínua: segunda ordem ou descontínua: primeira ordem).

Outra faceta intrigante a respeito dos fenômenos críticos é que eles apresentam *compor*tamentos universais, ou seja, mesmo sistemas fisicamente bastante díspares, como líquidos e ferromagnetos, podem apresentar comportamentos muito semelhantes na região crítica, o que fundamenta sua classificação em famílias (ditas *classes de universalidade*). Via de regra, todas as grandezas físicas que divergem na região crítica, como a susceptibilidade magnética ou o calor específico, o fazem segundo certas leis de potências, cujos expoentes (ditos *expoentes críticos*) são os elementos-chave para a supra-referida classificação.



Figura 3.2: Comportamento crítico universal de uma série de substâncias químicas ajustado por um polinômio cúbico. Ref [27]

Muito embora estejamos nos deparando apenas com fatos fenomenológicos, é sabido que existe uma contrapartida teórica que suporta a hipótese de universalidade. Para exemplificá-la abordaremos dois modelos de mecânica estatística bastante simples: o modelo de Ising e o gás de rede. Dessa forma, ficará evidente que um reduzido conjunto de ingredientes matemáticos — i.e. simetrias, dimensionalidade espacial e do parâmetro de ordem — regem a criticalidade independentemente da interação local entre as partes integrantes do sistema (*hipótese de escala*).

O modelo de Ising, proposto por Wilhelm Lenz em 1924 a Ernst Ising para sua tese de doutorado, consiste na primeira, e mais simples, tentativa de explicar o magnetismo por meio de interações locais entre spins vizinhos (situados nos vértices de redes d-dimensionais). A forma da interação entre spins-vizinhos é bastante simples, pois quaisquer spins S_i assumem valores ± 1 , em uma só direção espacial. Logo, sua hamiltoniana de interação (com campo magnético externo **B**) é definida por

$$H_{Ising} = -J \cdot \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \cdot S_j - B \cdot \sum_{\langle i \rangle} S_i, \qquad (3.1)$$

de modo que este modelo, na ausência do campo \mathbf{B} , é exatamente solúvel em até duas dimensões.

Uma das principais propriedades do modelo de Ising é que ele apresenta, em dimensões iguais ou superiores a dois, uma transição de fase de segunda ordem, na qual a magnetização

$$m = \sum_{\langle i \rangle} S_i, \tag{3.2}$$

assume o papel de parâmetro de ordem do sistema. Assim, à medida que resfriamos o sistema, aproximando-nos da temperatura crítica T_c , ocorre uma progressiva ordenação (espontânea) dos spins, que quebra a simetria global de inversão do modelo, caracterizando um fenômeno (cooperativo) de longo alcance.

Este tipo de comportamento é corroborado pela observação da existência de divergências em quantidades como a susceptibilidade magnética

$$\chi \equiv \left(\frac{\partial m}{\partial B}\right)_T = \left(\langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle^2\right) / k_B T, \qquad (3.3)$$

que fornece a correlação entre spins distantes, cujo comportamento — uma lei de potências com expoente crítico universal γ — é dado por

$$\chi \propto \left| T - T_c \right|^{-\gamma},\tag{3.4}$$

e enfatiza o desaparecimento de escalas características no sistema, assim como o previsto pela *hipótese de escala* [27, 28].

Adicionalmente, na região crítica, também são regidos por leis de potência o comprimento de correlação (ξ)

$$\xi = |T - T_c|^{-\nu}, \tag{3.5}$$

o calor específico c
 e a própria magnetização \boldsymbol{m}

$$c \sim |T - T_c|^{-\alpha}$$

$$m \sim |T - T_c|^{\beta},$$
(3.6)

cujos expoentes críticos ν , α , β , em conjunto com γ , determinam uma classe de universalidade.

Já o modelo do gás de rede, assim conhecido porque representa fluidos em redes ddimensionais, presta-se a uma descrição (simplificada) da transição de fase líquido-gás. Para implementá-lo, é postulado um potencial que atua entre pares de moléculas, situadas respectivamente, em posições $i \in j$

$$\begin{cases}
i = j \to V = \infty \\
i vizinho de j \to V = J \\
outros \quad casos \to V = 0,
\end{cases}$$
(3.7)

a fim de mimetizar a interação de Lennard-Jones. Assim, cada célula espacial e_i pode ser

etiquetada por com um dígito. Por exemplo, $e_i = 0$ significa sítio desocupado, enquanto $e_i = 1$ indica ocupado.



Figura 3.3: Transição ordem-desordem em um gás de rede. Note o aparecimento de clusters de todos os tamanhos para $T = T_c$ (e), (f). Ref [27]

Apesar de bastante simples, o modelo do gás de rede permite uma boa descrição do intrincado fenômeno da *opalescência crítica*, cuja completa compreensão desafiou físicos teóricos durante décadas [27]. A opalescência crítica faz-se presente em sistemas fluidos que se encontram muito próximos ao ponto crítico, propiciando um drástico espalhamento luminoso em todos os comprimentos de onda visíveis.

A explicação teórica mais eficaz destes fatos experimentais afirma que, na região crítica, ocorrem fenômenos cooperativos no fluido, em estrita analogia àqueles encontrados no modelo de Ising, gerando diversos *agrupamentos de moléculas* — com estruturas autosimilares, ou *fractais* — que propiciam o surgimento de um peculiar espalhamento luminoso.


Figura 3.4: Ao atingir $T = T_c$ (d) a mistura de ciclohexano-anilina exibe o fenômeno da opalescência crítica. Ref [27]

A presença de diversas semelhanças fenomenológicas em ambos os modelos supramencionados, como os seus comprimentos de correlação divergentes e os seus comportamentos cooperativos, indicam que possamos inter-mapeá-los [27], ainda que formalmente — como de fato é o caso — de modo a inserí-los em uma mesma classe de universalidade. Então, fica patente que fenômenos ao redor de pontos críticos não dependem rigidamente da natureza local das interações envolvidas, havendo portanto, uma suavização (dos detalhes finos) destas interações por causa de correlações de longa distância.

Além de gerais, esses conceitos também permitem que efetuemos poderosas previsões. Citemos por exemplo [14, 31] a existência de classes de universalidade que associam o comportamento de teorias quânticas de gauge d-dimensionais a temperatura finita — na aproximação quenched para os grupos SU(N) — e de sistemas clássicos de spin (d-1) dimensionais com simetria global Z_N . Isto é devido a correspondências (excepcionais) entre estes sistemas, como por exemplo, os parâmetros de ordem – loop de Polyakov e Magnetização¹ — serem ambas grandezas vetoriais e os grupos globais Z_N constituirem-se nos centros dos grupos de gauge SU(N).

Portanto, uma quebra espontânea de simetria dos centros dos grupos SU(N), como

¹Enquanto o loop de Polyakov relaciona-se à energia necessária para produzir um quark livre na QCD, a magnetização é relacionada à organização interna de um sistema de spins. Portanto, ambos são parâmetros que permitem-nos distinguir entre as diferentes fases de cada um dos sistemas.

ocorre na transição de desconfinamento (vide demonstração na próxima seção), estará universalmente associada [31] à transição ordem-desordem — e.g. magnetização espontânea — de sistemas de spins com simetrias globais Z_N .

3.2 QCD a temperatura finita e o plasma de quarks e glúons.

O estudo de campos quânticos a temperatura finita é o objetivo da teoria térmica de campos [45], que adotando tempos euclidianos (imaginários), admite uma natural introdução do conceito de temperatura de equilíbrio² [14, 45] do sistema. Quando regularizadas, no âmbito da formulação na rede, essas teorias de campo tornam-se (formalmente) modelos de mecânica estatística clássica, descortinando portanto, a computação (numérica) de vasto espectro de grandezas termodinâmicas analiticamente inalcançáveis [21]. Como exemplo, estudos numéricos da QCD [14] revelaram que em condições extremas, de densidade ou temperatura, a matéria hadrônica apresenta uma transição de desconfinamento de cor [17, 19] que produz o exótico Plasma de Quarks e Glúons (QGP).

Para os nossos estudos da QCD a temperatura finita, utilizaremos o método de quantização de Feynman[10], com o qual construimos a função de partição (canônica) [14] da teoria

$$Z(V,T) = \int DAD\psi D\overline{\psi} e^{-S_E(A,\psi,\overline{\psi},V,T)},$$
(3.8)

cuja dependência nos campos quânticos — i.e. $\psi, \overline{\psi} \in A$ — e na temperatura de equilíbrio T, é descrita pela seguinte ação euclidiana (no contínuo) a temperatura finita

$$S_E = \int_0^{1/T} dx_4 \int d^3 x_V \left(-\frac{1}{4} \sum_{A=1}^8 F^{A\mu\nu} F^A_{\mu\nu} + \sum_{j=1}^{n_f} \overline{\psi_j} \left(iD_\mu \gamma^\mu - m_j\right) \psi_j\right).$$
(3.9)

Para regularizar a integral de trajetória de (3.8) utilizamos a discretização espaçotemporal dada por uma rede com $N_{\sigma}^3 \times N_{\tau}$ sítios de espaçamento *a*. Portanto, o volume e a temperatura em (3.9) são, respectivamente, escritos como $V = (N_{\sigma}a)^3$ e $T^{-1} = N_{\tau}a$.

Nesse caso, o limite do contínuo é obtido tomando simultaneamente $a \to 0$ e $N_{\tau} \to \infty$ de tal forma que a temperatura física permaneça fixa. Assim, vale ressaltar que para introduzir

²Neste formalismo a dimensão temporal t é submetida a condições periódicas de contorno, sendo identificada com o inverso da temperatura de equilíbrio T pela identificação: $i\hbar t \rightarrow \frac{1}{T}$.

uma escala física (e.g. em MeVs) nas temperaturas de rede (i.e. $T^{-1} = N_{\tau}a$) devemos calibrá-las, confrontando os cálculos (na rede) com certas quantidades experimentais³.

Como na mecânica estatística a função de partição (3.8) é conectada [14] à densidade de energia livre (f) pela relação

$$f = -\frac{T}{V} \ln Z \left(V, T \right), \qquad (3.10)$$

são válidas as seguintes relações entre (3.10), a pressão (P) e as densidades de energia (ε) e entropia (s)

$$P = -f, \qquad \frac{\epsilon - P}{T^4} = T \frac{d}{dT} \left(\frac{P}{T^4}\right), \qquad \frac{s}{T^3} = \frac{\epsilon + P}{T^4} . \tag{3.11}$$

Por outro lado, este formalismo também possibilita-nos o cálculo de quaisquer outras quantidades termodinâmicas — i.e. $O(A, \psi, \overline{\psi})$ — como, por exemplo, funções de correlação de N-pontos. Para fazê-lo, é utilizada uma prescrição análoga a (2.29), isto é

$$\langle O \rangle = \frac{\int DAD\psi D\overline{\psi}O(A,\psi,\overline{\psi})e^{-S_E}}{\int DAD\psi D\overline{\psi}e^{-S_E}},$$
(3.12)

onde a ação euclidiana — a temperatura finita — (3.9) pode ser discretizada (como no capítulo 2).

A aplicação do supra-mencionado formalismo, no final dos anos 70 [30, 46], indicava que o QGP, assim como o seu análogo eletromagnético, deve sofrer efeitos de blindagem de Debye [42] (devido à liberdade das cargas de cor). Este efeito dotaria os glúons de uma massa dinâmica de Debye (μ), o que transformaria o potencial de longo alcance (2.36) em uma versão, efetivamente, do tipo Yukawa: $V(r) \approx \frac{\exp(-\mu r)}{r}$.

Então, em 1986 foi conjecturado por Satz [17] que — graças à blindagem do potencial entre $q\bar{q}$ — um plasma de quarks e glúons, com densidades de energia da ordem de 2.8 Gev/fm^3 , promoveria drástica supressão na formação de mésons pesados. Esta previsão é experimentalmente testável pelo exame da produção de mésons J/ψ (um estado ligado ${}^{3}S_{1}$ de $c\bar{c}$) em colisões nucleares de altas energias [19, 18], pois decaimentos como $J/\psi \to \mu^{+}\mu^{-}$ criam ressonâncias diretamente mensuráveis [22].

Já argumentos baseados no grupo de renormalização, que invocavam regimes a altas densidades e baixas temperaturas, previam um declínio no acoplamento efetivo entre quarks

³Utiliza-se geralmente a tensão de corda a temperatura finita, $\sigma \propto \frac{F_{q\overline{q}}(\overrightarrow{r},t)}{T}$, onde $F_{q\overline{q}}(\overrightarrow{r},t)$ é a energia livre do sistema quark anti-quark: $q\overline{q}$, que a T \rightarrow 0 reduz-se ao potencial inter-quarks (2.36). Logo, a escala desejada é obtida pela imposição de $\frac{T}{\sqrt{\sigma}} = \frac{1}{N_{\tau}\sqrt{\sigma}}$, onde $\sqrt{\sigma} \in \sqrt{\tilde{\sigma}}$ são, respectivamente, os valores experimental e de rede da tensão da corda à temperatura T.

e glúons [22], sugerindo portanto, um tratamento perturbativo do desconfinamento. Haja vista que, segundo tais argumentações, a superposição de hádrons produziria quarks com altos momentos, cuja dinâmica estaria sujeita à propriedade de liberdade assintótica da QCD.

Contudo, nos anos 80, Linde [21] apontou que a QCD (em condições extremas) guardava complicações até então inesperadas, pois mesmo a termodinâmica de campos de Yang-Mills é singular. Matematicamente, isto significa que cálculos perturbativos envolvendo massas gluônicas de Debye — geradas dinamicamente pelo QGP — apresentam divergências (não removíveis) já em ordem $O(\alpha_s^2)$.

Surgiu assim um crescente interesse por novas técnicas não-perturbativas, como as simulações de Monte Carlo na rede [22], que utilizando-se da aproximação quenched, provêem — pelo cálculo da energia livre $F_{q\bar{q}}$ entre quarks — um parâmetro de ordem (o loop de Polyakov [30, 47]) que bem caracteriza a transição de desconfinamento.

Para deduzir este parâmetro, utilizamos os operadores de criação $\psi_a^{\dagger}(\vec{r},t)$ e destruição $\psi_a(\vec{r},t)$ de quarks (estáticos e com cor "a"), bem como os seus conjugados de carga⁴ $\psi_a^{c\dagger}(\vec{r},t)$ e $\psi_a^c(\vec{r},t)$, para quem valem as relações

$$\begin{cases}
\psi_a\left(\overrightarrow{r_i},t\right),\psi_b^{\dagger}\left(\overrightarrow{r_j},t\right) \\
\psi_a^c\left(\overrightarrow{r_i},t\right),\psi_b^{c\dagger}\left(\overrightarrow{r_j},t\right) \\
=\delta_{ij}\delta_{ab}
\end{cases}$$
(3.13)

Uma vez tratando-se de quarks estáticos, ou seja, infinitamente massivos, sua evolução temporal é ditada pela seguinte equação de Dirac

$$\left(\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial t} - \overrightarrow{\tau} \cdot \overrightarrow{A^{0}}\left(\overrightarrow{r_{i}}, t\right)\right)\psi\left(\overrightarrow{r_{i}}, t\right) = 0, \qquad (3.14)$$

onde τ são geradores do grupo $SU\left(N\right)$ na representação fundamental. A integração de (3.14) resulta em

$$\psi\left(\overrightarrow{r_{i}},t\right) = T \exp^{\left[i\int_{0}^{t} dt' \,\overrightarrow{\tau} \cdot \overrightarrow{A^{0}}(\overrightarrow{r_{i}},t')\right]} \psi\left(\overrightarrow{r_{i}},0\right), \qquad (3.15)$$

onde T denota o operador de ordenação temporal.

Podemos agora utilizar os operadores $\psi \in \psi^c$ para obter uma expressão para a energia livre de uma configuração de N_q quarks e $N_{\overline{q}}$ anti-quarks. A expressão procurada pode ser escrita como

⁴Que criam e destroem quarks com a anti-cor de "a".

$$\exp\left[-\beta F\left(\overrightarrow{r_{1}}...\overrightarrow{r_{N_{q}}},\overrightarrow{r_{1}}...\overrightarrow{r_{N_{q}}}\right)\right] = \frac{1}{N^{N_{q}N_{\overline{q}}}} \sum_{|s\rangle} \langle s| \exp^{(-\beta H)} |s\rangle, \qquad (3.16)$$

onde somamos sobre todos os estados $|s\rangle$ de quarks
e anti-quarks pesados. O que resulta, de uma forma mais explícita, na expressão

$$\exp^{\left(-\beta F_{N_{q}N_{\overline{q}}}\right)} = \frac{1}{N^{N_{q}N_{\overline{q}}}} \sum_{|s'\rangle} \langle s'| \sum_{\{a,b\}} \psi_{a_{1}}\left(\overrightarrow{r_{1}},0\right) \dots \psi_{a_{N_{q}}}\left(\overrightarrow{r_{N_{q}}},0\right) \psi_{b_{1}}^{c}\left(\overrightarrow{r_{1}}',0\right) \dots \psi_{b_{N_{\overline{q}}}}^{c}\left(\overrightarrow{r_{N_{\overline{q}}}},0\right) \\ \times \exp^{\left(-\beta H\right)} \psi_{a_{1}}^{\dagger}\left(\overrightarrow{r_{1}},0\right) \dots \psi_{a_{N_{q}}}^{\dagger}\left(\overrightarrow{r_{N_{q}}},0\right) \psi_{b_{1}}^{c\dagger}\left(\overrightarrow{r_{1}}',0\right) \dots \psi_{b_{N_{\overline{q}}}}^{c\dagger}\left(\overrightarrow{r_{N_{\overline{q}}}},0\right) |s'\rangle$$

$$(3.17)$$

em que a soma sobre $|s'\rangle$ envolve apenas quarks leves (virtuais). Assim, uma reordenação ulterior ainda pode ser feita — utilizando-nos de (3.13) — para a obtenção de produtos normais.

Por fim, fazendo uso de (3.15) e de seu conjugado de carga, simultaneamente com (3.13) e com a seguinte **definição** do *loop de Polyakov*

$$L(\overrightarrow{r}) \equiv \frac{1}{N} TrT \exp\left[i \int_{0}^{\beta} dt \,\overrightarrow{\tau} \cdot \overrightarrow{A^{0}}(\overrightarrow{r_{i}}, t)\right], \qquad (3.18)$$

a expressão (3.17) converte-se em

$$\exp^{\left(-\beta F_{N_q N_{\overline{q}}}\right)} = Tr\left[\exp^{\left(-\beta H\right)} L\left(\overrightarrow{r_1}\right) \dots L\left(\overrightarrow{r_{N_q}}\right) L^{\dagger}\left(\overrightarrow{r_1}'\right) \dots L^{\dagger}\left(\overrightarrow{r_{N_{\overline{q}}}'}\right)\right],\tag{3.19}$$

onde o traço tomado atua somente nos estados do campo gluônico (puro).

A transcrição dessa quantidade para a rede euclidiana é feita mediante a introdução do transportador paralelo $U_{\mu}(\vec{r}) \equiv \exp\left[i\vec{\tau}\cdot\vec{A^{\mu}}(\vec{r})\right]$ — que parte de um elo no sítio \vec{r} com direção $\hat{\mu}$ — e que em termos das variáveis de elo (2.20), é escrito como

$$L_{\overrightarrow{r}} = \frac{1}{N} Tr \left[\prod_{\tau=1}^{N_{\tau}} U_{\hat{\tau}} \left(\overrightarrow{r}, \tau \right) \right].$$
(3.20)

Notemos que impondo condições de contorno periódicas sobre os $U_{\mu}(\vec{r},\tau)$, na direção τ , conferimos ao loop de Polyakov a propriedade de ser um invariante de gauge sob transformações de calibre periódicas⁵. Mas, por outo lado, ao transformarmos [22] todas as variáveis de elo (temporalmente orientadas) — localizadas entre duas seções espaciais

⁵Ou seja, via transformações de gauge como $U_{\tau}(\vec{r},\tau) \rightarrow g(\vec{r},\tau) U_{\tau}(\vec{r},\tau) g^{-1}(\vec{r},\tau+1)$, em que $g(\vec{r},1) \equiv g(\vec{r},N_{\tau}+1) \in SU(N)$.

consecutivas — segundo a relação

$$U_{\tau}\left(\overrightarrow{r},\tau\right) \to z \cdot U_{\tau}\left(\overrightarrow{r},\tau\right), \quad \left[\forall \overrightarrow{r}, \tau : fixo\right], \tag{3.21}$$

onde z é um elemento de Z_N [i.e. o centro⁶ do grupo SU(N)], induzimos uma alteração no valor do loop de Polyakov, que é descrita por

$$L_{\overrightarrow{r}} \to \exp^{\left(\frac{2\pi ik}{N}\right)} L_{\overrightarrow{r}}, \quad k \in \mathbb{Z}.$$
 (3.22)

É importante notar que (3.21) não altera, sob quaisquer condições, o valor da ação (2.19). Mas, tendo em vista que apenas um elemento $U_{\tau}(\vec{r}, \tau)$ em (3.20) é não-trivialmente modificado, este tipo de transformação implica que o loop de Polyakov é uma quantidade sensível à quebra de simetria global do centro Z_N de SU(N).

Como conseqüência, observemos que admitindo a simetria global Z_N como não-quebrada, todas as configurações de (3.20) são igualmente prováveis — pois $\sum_k \exp^{\left(\frac{2\pi ik}{N}\right)} = 0$ — o que implica $\langle L \rangle \equiv \sum_{\overrightarrow{r}} L_{\overrightarrow{r}} = 0$. Mas, quando esta simetria é quebrada, como ocorre na transição de desconfinamento, temos $\langle L \rangle \neq 0$ e, portanto, o loop de Polyakov é o parâmetro de ordem deste fenômeno.

Assim, em uma rede de volume espacial N_{σ}^3 e à temperatura N_{τ}^{-1} , a energia livre (i.e. potencial) de um par quark anti-quark $F_{q\bar{q}}(\vec{r},T)$ é obtida do valor esperado da função de correlação do loop de Polyakov

$$exp^{\left(\frac{-F_{q\overline{q}}(\overrightarrow{T},T)}{T}\right)} = \left\langle TrL_{\overrightarrow{x}}TrL_{\overrightarrow{y}}^{\dagger} \right\rangle, \qquad (3.23)$$

em que $rT = |\overrightarrow{x} - \overrightarrow{y}| / N_{\tau}$, com $L_{\overrightarrow{x}}$ e $L_{\overrightarrow{y}}^{\dagger}$ representando as fontes estáticas (de quark e anti-quark) nos pontos espaciais \overrightarrow{x} e \overrightarrow{y} . Já no limite $r \to \infty$, a função de correlação (3.23) tende para $|\langle L \rangle|^2$, onde $\langle L \rangle = N_{\sigma}^{-3} \langle \sum_{\overrightarrow{r}} TrL_{\overrightarrow{r}} \rangle$ denota o valor esperado do loop de Polyakov⁷.

⁶Se **g** é elemento do centro de um grupo de Lie **G** e **U** é um elemento qualquer deste grupo, então, por definição $g(x) U_{\mu}(x) g^{-1}(x + \hat{\mu}) \rightarrow U_{\mu}(x)$.

 $^{^7 {\}rm Que}$ portanto, é associado a energia necessária — $F_q(\overrightarrow{r},T)$ — para criar um quark livre.



Figura 3.5: Loop de Polyakov: em uma representação esquemática bidimensional. Ref. [22].

Concluímos então que a simetria (3.22) não precisa ser dinamicamente realizada quando configurações de campos, equivalentes sob transformações em Z_N , não puderem ser continuamente conectadas pela interpolação de configurações de campo (com energia finita). Nestes casos, dizemos que houve uma quebra espontânea de simetria, o que provoca o levantamento da degenerescência dos N estados-equivalentes do parâmetro de ordem \vec{L} , alterando o seu valor esperado para

$$\langle L \rangle = \begin{cases} 0 \iff fase \ confinada : \ T < T_c \\ > 0 \iff fase \ desconfinada : \ T > T_c \end{cases}$$
(3.24)

Portanto, presenciamos aqui a emergência de uma teoria efetiva para o comportamento do parâmetro de ordem L. No caso da QCD quenched o modelo efetivo resultante [31] é um sistema de spins (com simetria global Z_3) cuja classe de universalidade sugere uma transição de desconfinamento de primeira ordem [14]. Contudo, estudaremos numericamente a teoria de YM SU(2) [34] em 3d, que está associada ao modelo de Ising bidimensional [31] (com transição de fase de segunda ordem).

Capítulo 4

Simulações Numéricas

God does not care about our mathematical difficulties. He integrates empirically — de Einstein a Infield, 1942.

4.1 Integração funcional e os métodos de Monte Carlo.

Quando formuladas em espaços-tempo euclidianos, teorias quânticas de campo guardam estreita relação com sistemas estatísticos clássicos [25]. Nesta perspectiva a distribuição de probabilidades d_{μ}

$$d_{\mu} = \frac{1}{Z} e^{-S_E[\Psi]} \prod_{x} d\Psi(x) , \qquad (4.1)$$

construída com o auxílio da ação euclidiana (S_E) e de um funcional gerador (Z), permite que valores esperados dos operadores $F[\Psi]$, dependentes do campo quântico $\Psi(x)$, sejam estimados por

$$\langle F\left[\Psi\right]\rangle = \int d_{\mu}F\left[\Psi\right]. \tag{4.2}$$

Assim, o caráter funcional desta integração indica o cômputo, não-trivial, de todas as configurações de Ψ em cada ponto do espaço-tempo. Contudo, no caso contínuo (i.e. $x \in \Re$), o produtório em (4.2) gera uma medida $d\Psi(x)$ mal definida¹, o que exige um procedimento matemático de *regularização* para a remoção de ambigüidades.

Uma das formas de regularização provém da discretização do espaço-tempo euclidiano, particionando-o em células unitárias de volume finito, o que reduz a quantidade de integrais

¹Porque exige a execução de um número infinito (não-denumerável) de integrações.

funcionais em (4.2) para um infinito-denumerável. Logo, em um volume espaço-temporal arbitrariamente grande, os valores médios dos observáveis $F[\Psi]$ são obtidos efetuando

$$\langle F\left[\Psi\right]\rangle = \frac{\sum_{\Psi(x)} F\left[\Psi\right] e^{-S_E[\Psi]}}{\sum_{\Psi(x)} e^{-S_E[\Psi]}},\tag{4.3}$$

como um a soma (espacial) das configurações do campo Ψ .

Devido à forma funcional de (4.3), é usual calculá-la com técnicas estocásticas de integração numérica, como os *métodos de Monte Carlo* (MC) [23, 24], que convergem, em contraste aos métodos determinísticos [48], com velocidade independente da dimensão do espaço de integração².

O mais simples método de Monte Carlo, chamado *método estático*, já permite o cálculo de integrais como

$$I = \int_{a}^{b} \frac{f(x)}{b-a} dx, \qquad (4.4)$$

utilizando o sorteio independente de N valores aleatórios (uniformemente distribuídos) da variável $x_i \in [a, b]$. Neste processo, a integral I é reinterpretada como uma média estatística da variável aleatória f(x), com medida uniforme

$$u(x)dx \equiv \frac{dx}{b-a},\tag{4.5}$$

sendo portanto bem aproximada pelo valor médio \overline{f}

$$\overline{f} \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f(x_i), \qquad (4.6)$$

que $f(x_i)$ assume após N sorteios dos x_i . Assim, o erro (estatístico) associado a esta estimativa é dado pelo desvio padrão ($\sigma_{\overline{f}}$)

$$\sigma_{\overline{f}} = \sqrt{\frac{\left\langle \left[f\left(x_{i}\right) - \left\langle f\left(x_{i}\right)\right\rangle\right]^{2}\right\rangle}{N-1}},\tag{4.7}$$

que vai a zero quando $N \to \infty$.

Mas, embora perfeitamente operacional, o método estático é pouco eficiente em ex-

²Métodos determinísticos típicos, como o de Simpson [48], convergem após N iterações em um espaço d-dimensional com velocidades de ordem $O(N^{-d/4})$, enquanto o método de Monte Carlo converge com $O(N^{-1/2})$.

pressões como (4.2), em que as medidas de integração (não-uniformes) suprimem, com pesos de Boltzmann da ação (4.1), diversas configurações de $F[\Psi]$. Logo, a *amostragem por importância*, isto é, o sorteio de números aleatórios em intervalos de pequena supressão de $F[\Psi]$, é uma alternativa ideal a ser implementada, em casos simples, pelo *método da rejeição* [48] ou, de forma geral, por *métodos dinâmicos* (que amostram *exatamente* a função-peso).

Geralmente, métodos dinâmicos de amostragem são construídos a partir de dinâmicas computacionais (não-físicas) — daí o nome simulação — em que processos estocásticos [49], como cadeias de Markov³, evoluem computacionalmente (no tempo de Monte Carlo) segundo um algoritmo ergódico⁴ (de termalização), que gere um estado estacionário independente de condições iniciais — com distribuição de probabilidades igual à funçãopeso procurada. Assim, após termalizadas as variáveis Ψ — de elos, no nosso caso — o cálculo das médias estatísticas, como (4.6), é convertido na computação (medição) temporal (de MC) de configurações, com distribuição de equilíbrio, de funcionais como (4.3).

4.2 Termalização

Termalização é o procedimento algorítmico empregado em métodos dinâmicos de Monte Carlo para a geração de novas configurações (independentes) das variáveis de integração. Algumas classes destes algoritmos, ditas locais, têm uma vasta gama de aplicabilidade, servindo, por exemplo, para a simulação de sistemas de spins-contínuos e teorias de gauge⁵. Portanto, esta seção é dedicada a uma detalhada exposição do assunto, tendo em vista que algoritmos eficientes habilitam estudos de alta precisão com baixos custos computacionais.

4.2.1 Abordagens usuais

O algoritmo de banho-térmico

Este tipo de algoritmo produz a evolução temporal — no tempo de MC — de um certo processo estocástico (cadeia de Markov) segundo leis locais. Para tal, em um processo de

³Processos estocásticos cuja matriz de transição, responsável por sua evolução temporal (de MC), implicam dependência do futuro com o passado somente pelo passo presente [36].

⁴Que permite a visitação de todos os estados acessíveis do sistema.

⁵Quadri-vetores unitários pertencentes à esfera S^3 são mapeáveis por meio da eq. (4.8) em matrizes de Pauli. Portanto, o mesmo algoritmo utilizado para simular certos sistemas de spins [modelo O(4)] pode ser empregado no estudo da teoria de gauge SU(2).

varredura da rede, cada variável de elo (ou spin) é atualizada individualmente, obedecendo a distribuição de equilíbrio — i.e. um peso de Boltzmann da ação da teoria (4.1) — em que apenas *primeiros vizinhos* exercem colaborações.

Assim, após certo número de varreduras, a distribuição de configurações da cadeia de Markov converge para um valor independente de condições iniciais. Dizemos então que o sistema está *termalizado* e, portanto, apto à medição (ou cálculo) de funcionais como (4.2).

Em nossos estudos construímos rotinas de termalização para o grupo SU(2), cujos elementos (na representação fundamental) [8] são escritos como

$$g \equiv g_0 \mathbf{1} + \mathbf{i} \,\overrightarrow{\sigma} \cdot \overrightarrow{g} = \begin{pmatrix} g_0 + ig_3 & g_2 + ig_1 \\ -g_2 + ig_1 & g_0 - ig_3 \end{pmatrix},\tag{4.8}$$

onde $\overrightarrow{\sigma} \equiv (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ denotam as matrizes de Pauli e, portanto, os elementos inversos de (4.8) são

$$g^{\dagger} = g^{-1} = g_0 \mathbf{1} - \mathbf{i} \,\overrightarrow{\sigma} \cdot \overrightarrow{g}. \tag{4.9}$$

Para obter o vínculo de unitariedade — det(g) = 1 — impomos $g_0^2 + g_1^2 + g_2^2 + g_3^2 = 1$ e assim os coeficientes **g** de uma matriz de SU(2) também podem ser interpretados como um vetor unitário quadridimensional. Portanto, utilizando esta representação, variáveis de elo da teoria de YM são tratadas em estrita analogia com (4.8), ou seja

$$U_{\mu}(x) = A_{0,\mu}(x) \, 1 + i \, \overrightarrow{\sigma} \cdot \overrightarrow{A_{\mu}}(x) \,. \tag{4.10}$$

Já o caráter local da ação de Wilson (2.19) permite-nos re-expressar [51] sua forma de atuação sobre as variáveis individuais de elo $U_{\mu}(x)$ de modo bastante conveniente

$$S_{E(1Link)} = -\frac{\beta}{2} Tr \left[U_{\mu} \left(x \right) H_{\mu} \left(x \right) \right] + constante, \qquad (4.11)$$

onde $H_{\mu}(x)$ — em analogia a sistemas de spins — é o *campo magnético efetivo* gerado pelos vizinhos próximos de $U_{\mu}(x)$, matematicamente explicitado em termos de uma soma sobre grampos [i.e. semi-circuitações em torno de $U_{\mu}(x)$] como

$$H_{\mu}(x) \equiv \sum_{\nu \neq \mu} \left[U_{\nu} \left(x + e_{\mu} \right) U_{\mu}^{-1} \left(x + e_{\nu} \right) U_{\nu}^{-1} \left(x \right) + U_{\nu}^{-1} \left(x - e_{\nu} + e_{\mu} \right) U_{\mu}^{-1} \left(x - e_{\nu} \right) U_{\nu} \left(x - e_{\nu} \right) \right].$$
(4.12)

Também vale notar que, como $H_{\mu}(x)$ provém da soma de elementos de SU(2), é usual [51] empregar o fator de normalização $N_{\mu}(x) \equiv \sqrt{\det H_{\mu}(x)}$ para que na igualdade

$$H_{\mu}(x) \equiv N_{\mu}(x)H_{\mu}(x) \tag{4.13}$$

tenhamos $\widetilde{H_{\mu}(x)} \in SU(2).$

Portanto, a geração da nova variável de elo (ou spin) $U_{\mu}(x)$ — que substituirá o antigo $U_{\mu}(x)$ — é feita amostrando-se uma matriz de evolução (aleatória) $V_{\mu}(x)$, segundo a distribuição de probabilidades

$$dP\left(V_{\mu}\left(x\right)\right) \sim dV_{\mu}\left(x\right)exp\left\{\frac{\beta}{2}Tr\left[V_{\mu}\left(x\right)H_{\mu}\left(x\right)\right]\right\}.$$
(4.14)

Esta expressão pode ser analiticamente simplificada, utilizando as invariâncias (por multiplicação) da medida de Haar⁶ [44] de SU(2): $dV_{\mu}(x) \sim d^4v\delta(v^2 - 1)$ [51] e a normalização (4.13), de onde obtemos as relações

$$dP\left(V_{\mu}\left(x\right)\widetilde{H_{\mu}^{-1}\left(x\right)}\right) \sim dV_{\mu}\left(x\right)exp\left\{\frac{\beta}{2}Tr\left[V_{\mu}\left(x\right)\widetilde{H_{\mu}^{-1}\left(x\right)}H_{\mu}\left(x\right)\right]\right\}$$

$$\sim dV_{\mu}\left(x\right)exp\left[\frac{\beta}{2}N_{\mu}(x)TrV_{\mu}\left(x\right)\right]$$

$$\sim d^{4}v\delta\left(v^{2}-1\right)exp\left[\frac{\beta}{2}N_{\mu}(x)TrV_{\mu}\left(x\right)\right]$$

$$\sim d^{4}v\delta\left(v^{2}-1\right)exp\left[\beta N_{\mu}(x)v_{0}\right].$$

$$(4.15)$$

Então, após integrar (4.15) (para eliminar a dependência explícita com v^2), obtemos o passo de atualização do algoritmo de banho-térmico, no qual a antiga variável $U_{\mu}(x)$ é substituída, ou seja

$$U_{\mu}(x) \to V_{\mu}(x) \widetilde{H_{\mu}^{-1}(x)},$$
 (4.16)

onde $V_{\mu}(x)$, também um elemento de SU(2), tem a componente v_0 sorteada segundo

$$dP(v_0) \sim \sqrt{1 - v_0^2} exp \left[\beta N_\mu(x) v_0\right]$$
 (4.17)

e as demais componentes — i.e. $\vec{v} \equiv (v_1, v_2, v_3)$ — uniformemente geradas sobre uma esfera tridimensional de raio $\sqrt{1-v_0^2}$, o que é facilmente implementado [48] em coordenas cilíndricas

⁶Medida de integração, invariante por multiplicações à direita, que permite o cálculo em variedades (grupos) de Lie.

$$v_{1} = \sqrt{(1 - \rho^{2})(1 - v_{0}^{2})} \cos(\varphi),$$

$$v_{2} = \sqrt{(1 - \rho^{2})(1 - v_{0}^{2})} \sin(\varphi),$$

$$v_{3} = \sqrt{(1 - v_{0}^{2})}\rho,$$
(4.18)

com as variáveis aleatórias: $\rho \in [-1, 1]$ e $\varphi \in [0, 2\pi]$.

Contudo, a amostragem numérica de (4.17) é um procedimento intrincado, para o qual foram desenvolvidos métodos que se utilizam das tradicionais técnicas da *Transformação* e da *Rejeição* [48]. Dentre estes métodos, citamos por exemplo aquele devido a Creutz [51], que consiste em amostrar a distribuição (4.17) em duas etapas. Na primeira, v_0 é gerado exatamente como uma distribuição exponencial, mediante a transformação

$$v_0 = 1 + \frac{\ln(\lambda)}{\beta N_\mu(x)},\tag{4.19}$$

com λ uma variável aleatória uniformemente sorteada no intervalo $\lambda \in (e^{-2\beta N_{\mu}(x)}, 1)$.

Na segunda etapa, com o intuito de obter o fator $\sqrt{1-v_0^2}$ presente em (4.17), empregase o método da rejeição, com o qual v_0 é aceito com uma probabilidade $\sqrt{1-v_0^2}$. Ou seja, esse fator é comparado com um número aleatório η — gerado uniformemente no intervalo [0,1] — se $\eta \leq \sqrt{1-v_0^2}$ há aceitação de v_0 , caso contrário, a primeira etapa deve ser retomada.

O segundo método, devido a Kennedy e Pendleton [50], também funciona em duas etapas que combinam as técnicas de transformação e rejeição. Inicialmente, efetua-se a seguinte mudança de variáveis: $\delta = \sqrt{1 - v_0}$ em (4.17), que resulta em uma distribuição para a nova variável $\delta - \text{com } 0 \le \delta \le \sqrt{2}$ - dada por

$$P(\delta)d\delta \sim \sqrt{1 - \frac{1}{2}\delta^2} \,\delta^2 exp\left\{-\left[\beta N_\mu(x)\right]\delta^2\right\} d\delta.$$
(4.20)

Para grandes valores de $[\beta N_{\mu}(x)]$ esta distribuição é concentrada em torno de $\delta = 0$. Logo, a proposta de [50] é amostrar exatamente — no intervalo $0 \le \delta < \infty$ — a seguinte distribuição

$$P(\delta)d\delta \sim \delta^2 exp\left\{-\left[\beta N_{\mu}(x)\right]\delta^2\right\}d\delta,\tag{4.21}$$

com o tradicional método de Box-Muller⁷ [48] (pesado por um fator δ^2) e finalmente, via rejeição, introduzir o fator $\sqrt{1 - \frac{1}{2}\delta^2}$ de onde é extraido $v_0 = 1 - \delta^2$.

O algoritmo de sobre-relaxação microcanônica

Apesar do algoritmo de banho-térmico ser perfeitamente ergódico, e portanto plenamente capaz de efetuar as desejadas atualizações de Monte Carlo, seu caráter puramente local produz pequenos saltos (individuais) no espaço de configurações. Tal característica é incômoda pois resulta em cadeias de Markov fortemente correlacionadas, favorecendo o aparecimento do fenômeno de frenamento crítico⁸ (*critical slowing down*), notadamente no limite $\beta \to \infty$.

Uma observação crucial é que para driblar estas correlações há a necessidade de efetuarmos um maior número de passos de Monte Carlo, para gerar configurações realmente independentes, demandando portanto, maior esforço computacional. Frisamos ainda que a descorrelação das amostras — configurações dos campos em toda a rede — é de suma importância para a precisão das simulações, pois a velocidade de convergência de MC é $O(N^{-1/2})$ somente para amostras independentes.

Felizmente, há uma forma de minimizar este severo problema. A idéia básica [51, 52] é empregar uma transformação micro-canônica — i.e. que não altera o valor de (4.11) a cada variável de elo da rede, permitindo assim uma maior descorrelação entre sucessivas amostras. Uma das possíveis formas de implementá-la vem da aplicação, a cada elo da rede, da seguinte sobre-relaxação micro-canônica

$$U_{\mu}(x) \to \widetilde{H_{\mu}^{-1}(x)} Tr\left[U_{\mu}(x)\widetilde{H_{\mu}(x)}\right] - U_{\mu}(x).$$
(4.22)

A vantagem desse método está na promoção de grandes mudanças nas configurações do sistema — sem violar a ergodicidade do banho-térmico — consistituindo portanto uma técnica indispensável às simulações de alta precisão.

⁷Tradicional método para a geração de distribuições aleatórias segundo distribuições normais.

 $^{^8 \}rm Este$ fenômeno implica que o tempo de correlação em simulações de Monte Carlo é proporcional a uma potência do tamanho linear da rede.

4.2.2 Novas abordagens

Overheat bath e o Banho-térmico modificado

O uso conjunto (híbrido) dos algoritmos de banho-térmico e sobre-relaxação consiste no procedimento usual para a termalização de teorias de gauge na rede. Contudo, nos anos 90, uma alternativa mais eficiente foi aventada [53]. Nesta abordagem ambos os algoritmos são fundidos, originando uma atualização sobre-relaxada dos elos (daí o nome *algoritmo de overheat bath* ou OhB).

No algoritmo OhB a geração de novas variáveis de elo (ou spin) é sutilmente alterada pela minimização (dinâmica) do produto escalar entre o novo e o velho spin⁹. O que em linguagem matricial [53] é a minimização (absoluta) do traço do produto entre o novo elo e o (complexo conjugado) do antigo. Isto é conseguido tomando-se em (4.18) \vec{v} =- \vec{u}_{antigo} (onde $U_{\mu}^{antigo} = u_o 1 + i\vec{\sigma} \cdot \vec{u}_{antigo}$).

Como consequência direta desta proposta, embora v_0 seja gerada como em (4.17), as demais coordenadas (4.18) são obtidas (deterministicamente) pela reversão de sinal — e normalização, já que v_0 é modificada — das respectivas componentes da antiga variável de elo. Assim, esta abordagem acelera consideravelmente a etapa de termalização, mas, ao contrário dos tradicionais métodos híbridos, não tem a sua ergodicidade assegurada [53].

Visando incorporar a excepcional idéia de [53] e ao mesmo tempo garantir ergodicidade, introduzimos em [35] uma versão modificada do algoritmo de banho-térmico, que denominamos MHB. Nossa proposta baseia-se no fato de que o usual processo de geração das componentes (4.18) — que é ergódico — não fixa o sinal das raízes quadradas envolvidas, e portanto, escolhemo-los a fim de minimizar — embora de modo não-absoluto — o produto escalar do novo e velho spin (ou traço do produto de elos). Para realizá-lo calculamos $W = w_o 1 + i\vec{\sigma} \cdot \vec{w} = U_{\mu}^{velho}$, então se $\vec{w} \cdot \vec{v} > 0$ efetuamos $\vec{v} \to -\vec{v}$ em (4.18).

Apesar de MHB ser uma alteração simples do algoritmo de HB esperamos um considerável ganho de desempenho, enquanto (por construção) a sua ergodicidade é garantida. Desse modo, para a verificação de nossas expectativas, se faz necessária uma análise comparativa de desempenho dos algoritmos de termalização. Mas, este procedimento envolve, necessariamente, um cuidadoso tratamento dos erros de integração (estocástica), pois eles estão associados, diretamente, à eficiência (de descorrelacionamento temporal) de cada algoritmo.

 $^{^9 \}rm Observe$ que em um sistema de spins isto se refletiria na geração do maior deslocamento (angular) micro-canonicamente possível.

4.3 Estimando erros estatísticos

Como já exposto, sabemos que os métodos estocásticos aplicados em simulações de Monte Carlo produzem erros numéricos de natureza estatística, que em primeira análise são dados por (4.7). Contudo, esta estimativa não considera a existência de correlações entre as variáveis aleatórias amostradas, o que nos leva a *subestimar* os verdadeiros erros cometidos [23, 24].

De fato, quaisquer algoritmos de termalização — como os expostos na seção anterior — introduzem certa correlação entre as amostras produzidas, característica esta inerente às suas dinâmicas. Portanto, a tarefa de quantificar o tempo de Monte Carlo de descorrelação¹⁰ cumpre duplo papel, permitindo que possamos obter exatamente os erros estatísticos e introduzindo um bom indicador da eficiência algorítmica.

Para tal, consideremos que em uma simulação seja obtida uma série de medidas \mathcal{O}_{i} , cuja média exprima a espectativa de um observável físico de interesse (4.3). Chamamos de *auto-correlação normalizada* [36, 23, 24] a função $\rho_f(k) = \frac{C_f(k)}{C_f(0)}$ que mede a dependência estatística entre os valores assumidos por $\mathcal{O}_k \in \mathcal{O}_{i+k}$ (i.e. respectivamente, na k-ésima e na k+i-ésima medidas do observável \mathcal{O}). Matematicamente, esta quantidade é dada por

$$\rho_{f\mathcal{O}}(k) = \frac{\left\langle \mathcal{O}_{i}\mathcal{O}_{i+k} \right\rangle - \left\langle \mathcal{O}_{i} \right\rangle^{2}}{\left\langle \mathcal{O}_{i}^{2} \right\rangle - \left\langle \mathcal{O}_{i} \right\rangle^{2}},\tag{4.23}$$

onde $\langle \cdot \rangle$ representa a média sobre o indice i.

Tipicamente a função de auto-correlação normalizada $\rho_f(t)$ decai exponencialmente $(\sim e^{-|t|/\tau})$ para grandes valores de t. Portanto, é natural que se defina o tempo de autocorrelação exponencial para a série do observável \mathcal{O} como

$$\tau_{exp,\mathcal{O}} = \lim_{t \to \infty} \sup \frac{t}{-\log |\rho_{f,\mathcal{O}}(t)|}.$$
(4.24)

Observemos que mediante a definição acima, $\tau_{exp,O}$ é interpretado como a escala de relaxação temporal do modo mais lento de decaimento desse sistema.

Por outro lado, há uma outra quantidade de grande interesse para as nossas finalidades: o *tempo integrado de auto-correlação*, que é definido como

$$\tau_{int} = \frac{1}{2} + \sum_{t=1}^{\infty} \rho_f(t), \qquad (4.25)$$

¹⁰Intervalo do tempo computacional que é dispendido na produção de sucessivas amostras independentes.

e cuja propriedade $\tau_{int} \approx \tau_{exp}$ é respeitada no regime em que $\rho_f(t) \sim e^{-|t|/\tau}$, o que normalmente ocorre para $\tau \gg 1$. Dessa forma, o tempo integrado de auto-correlação é a grandeza que controla o erro estatístico de Monte Carlo, especialmente quando médias como (4.6) são tomadas sobre variáveis correlacionadas.

Esta última asserção foi demonstrada cuidadosamente em [36], sob a condição de que $N \gg \tau$, o que implica nas seguintes relações matemáticas

$$\sigma_{f}^{2} = \frac{1}{N^{2}} \sum_{r,s=1}^{N} C_{f}(r-s)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{t=-(N-1)}^{N-1} \left(1 - \frac{|t|}{N}\right) C_{f}(r-s) \qquad (4.26)$$

$$\approx \frac{1}{N} (2\tau_{int,f}) C_{f}(0),$$

que contêm o caso particular (4.7) quando $\tau_{int,f}$ é mínimo (i.e. $\tau_{int,f} = 0.5$).

Um ponto importante na implementação dos estimadores para $\tau_{int,f}$ é que o ruído (i.e. as flutuações estatísticas) presente no *sinal* (i.e. função decaimento exponencial) pode tornar-se bastante intenso nessas séries temporais, daí a necessidade da adoção de um método que possa lidar com esse fenômeno, como é o caso da *Janela Auto-Consistente* [36]. Nesta abordagem apenas o modo mais lento de decaimento de $\tau_{int,f}$ é computado, uma vez que o somatório em (4.25) é limitado iterativamente a um número máximo M de termos, ou seja

$$\tau_{int(M)} = \frac{1}{2} + \sum_{t=-(N-1)}^{N-1} \lambda(t)\rho_f(t), \qquad (4.27)$$

com a função de corte

$$\lambda(t) = \begin{cases} 1 & se \quad |t| \le M \\ 0 & se \quad |t| > M \end{cases},$$
(4.28)

definida em termos do inteiro M (que obedece ao vínculo dinâmico $M \ge c\tau_{int(M)}$, com $c \in \mathbb{N}$ fixado no intervalo $c \in [4, 10]$). Notemos ainda que o erro cometido no truncamento da série (4.25) é dado [36], no intervalo $\tau \ll M \ll N$, pela seguinte relação

$$\sigma_{\tau_{int(M)}}^2 \approx \frac{2(2M+1)}{N} \tau_{int(M)}^2.$$
 (4.29)

4.4 Escala de tamanho finito

To see a World in a Grain of Sand and a Heaven in a Wild Flower Hold Infinity in the palm of your hand and Eternity in an hour. *Auguries of Innocence*, William Blake.

Simulações numéricas são inexoravelmente limitadas a sistemas finitos. Portanto, a extração de previsões físicas no limite termodinâmico — como os expoentes críticos da QCD a temperatura finita — parecem ser impossíveis. Contudo, existem certas técnicas numéricas que nos permitem contornar tais limitações computacionais.

Estas técnicas são conhecidas por escala de tamanho finito (FSS)¹¹ [23, 24] e baseiam-se na verificação de que o valor médio de certos observáveis O — com comportamento crítico do tipo¹² $t^{-\Theta}$ — em uma rede finita (de tamanho linear N_s), sofre a seguinte dependência funcional

$$O\left(t, N_s\right) = N_s^{\Theta/\nu} Q_O\left(t \cdot N_s^{1/\nu}\right). \tag{4.30}$$

De onde é fácil ver que, executando nossas simulações a t = 0, podemos obter

$$O\left(N_{s}\right) = N_{s}^{\Theta/\nu}Q_{O}\left(0\right),\tag{4.31}$$

ou seja, a função Q_O torna-se uma mera constante, o que abre a possibilidade de extrairmos via processo limite — a partir da análise da dependência de sua escala espacial — o comportamento termodinâmico do observável O. Portanto, uma boa precisão na extração de propriedades termodinâmicas está associada ao exato conhecimento da temperatura crítica do sistema, o que deve ser cuidadosamente efetuado [23, 24].

No caso de teorias de campo (ou sistemas de spins), uma das formas de encontrar (aproximadamente) a temperatura crítica se dá pela localização do pico da sua "susceptibilidade magnética" ¹³, que no caso da teoria de YM é definida por

$$\chi_{\nu} = \left\langle L^2 \right\rangle - \left\langle |L| \right\rangle^2, \tag{4.32}$$

¹¹Do original em inglês: *Finite-Size-Scaling techniques*.

¹²Onde t é a *temperatura reduzida* definida como $t = \frac{T - T_c}{T_c}$.

¹³Que para uma rede de tamanho finito, mesmo para transições de segunda ordem, nunca apresenta uma real divergência.

e (devido a efeitos de tamanho finito) apresenta um pico — mais ou menos estreito — em torno da temperatura crítica T_c .

Quando estudos mais apurados são necessários, o método do *cumulante de Binder de quarta ordem* [23] apresenta-se como uma alternativa consideravelmente mais precisa, isto porque em tal abordagem efeitos de volume finito são automaticamente ponderados. A aplicação deste método consiste em calcular a seguinte quantidade

$$B_c = \frac{\langle L^4 \rangle}{\langle L^2 \rangle^2} - 3, \tag{4.33}$$

para uma certa variedade de tamanhos de rede, em intervalos de temperaturas que (possivelmente) contenham T_c . Os resultados são então graficados simultaneamente, sendo observado um cruzamento — i.e. um ponto fixo — exatamente na temperatura crítica do sistema¹⁴.

Devemos considerar ainda uma outra forma de análise de FSS, dada pelo *Método do* χ^2 [37], que se fundamenta no comportamento da quantidade $\chi_{\nu} = N_S^2 \langle L^2 \rangle$ a tamanhos finitos

$$\chi_{\nu}(t, N_S) = N_S^{\gamma/\nu} \left\{ c_0 + \left(c_1 + c_2 N_S^{-\omega} \right) t N_S^{1/\nu} \right\},$$
(4.34)

onde $c_0...c_2$ são constantes, e omega é um expoente da ordem de 1. Logo, conhecendo a temperatura crítica estaremos habilitados a ajustar — minimizando o desvio quadrático médio — a seguinte expansão de (4.34) a t = 0

$$\ln [\chi_{\nu} (N_S)] = \ln (c_0) + \frac{\gamma}{\nu} \ln (N_S) + \dots$$
(4.35)

aos dados provenientes das simulações numéricas e, consequentemente, obteremos a razão $\left(\frac{\gamma}{\nu}\right)$ — entre os expoentes críticos (3.4) e (3.5) — no regime termodinâmico.

4.5 O método variacional e as massas de blindagem

Como vimos no Capítulo 3 as funções de correlação do parâmetro de ordem da QCD — o loop de Polyakov — permitem estimar a energia de ligação entre quarks, de onde as massas de blindagem — que surgem no contexto de um meio desconfinate — podem ser extraídas. Considerando a natureza não-perturbativa destes cálculos, é comum o empreendimento de

 $^{^{14}}$ Há que se notar que redes pequenas não geram curvas com cruzamento no devido ponto fixo. Portanto, atentando para este fato, nos é possível impor — ainda que grosseiramente — certas dimensões mínimas para as redes empregadas em nossas simulações.

análises numéricas em que observáveis como (3.23) podem ser medidos via (4.3). Contudo, o decaimento espacial desta função de correlação é influenciado, sobremaneira, pela massa do estado fundamental do espectro, o que prejudica o estudo dos estados excitados.

Uma alternativa provém da adaptação de técnicas (variacionais) de espectroscopia, desenvolvidas para sistemas de spins [38], para o caso das teorias de gauge [33]. Este método [33] consiste na análise conjunta dos modos de decaimento de uma família de operadores — construída iterativamente a partir do parâmetro de ordem — o que conduz à sondagem de diferentes comprimentos de correlação, cada qual devido a uma escala (massa de blindagem) do espectro.

Para efetuar este tipo de investigação geralmente são estudados operadores de momento zero, ou seja, definidos ao longo de fatias espaciais da rede, isto porque (sendo espacialmente extensos) eles também são projetáveis nos estados excitados do sistema. Isto se ilustra expandindo — na base dos auto-estados $|i\rangle$ da matriz de transferência [26] — a função de correlação entre dois operadores (digamos **A** e **B**) de momento zero

$$G_{AB}(|R|) = \langle A(0) B(|R|) \rangle = \sum_{i} c_{i}^{AB} \exp(-m_{i} |R|), \qquad (4.36)$$

onde os valores dos coeficientes $c_i^{AB} = \langle 0 | A | i \rangle \langle i | B | 0 \rangle$ evidenciam a qualidade da projeção.

Uma forma sistemática de generalizar estes resultados para uma quantidade qualquer de operadores é dada [38, 33] pela construção de uma *matriz de correlação cruzada*

$$C_{\alpha\beta}\left(|R|\right) = \left\langle A_{\alpha}\left(0\right)A_{\beta}\left(|R|\right)\right\rangle - \left\langle A_{\alpha}\left(0\right)\right\rangle\left\langle A_{\beta}\left(|R|\right)\right\rangle,\tag{4.37}$$

que permite considerar as correlações entre (todos) os pares de operadores A_{α}, A_{β} de uma família [33]. Assim, analisando o decaimento espacial dos autovalores λ_i (|R|) de (4.37), podemos extrair as massas de blindagem m_i com o seguinte Ansatz de ajuste

$$\lambda_i(|R|) = Const_0 + Const_1 \cdot \left[e^{-m_i|R|} + e^{-m_i(N_S - |R|)}\right].$$
(4.38)

Isto deve ser feito tendo em mente que a razão sinal/ruído — normalmente proporcional a $\sqrt{Tempo \ Computacional}$ — é o fator preponderante na precisão dos ajustes [54], já que esta quantidade repercute diretamente na dispersão estatística dos dados.

Particularmente, no caso da teoria de YM SU(2) em 2+1 dimensões, utilizamos —

inspirados em [33] — o seguinte operador médio (i.e. de momento nulo) de Polyakov

$$\overline{L}(x) = \frac{1}{N_y} \sum_{n=1}^{n=N_y} L(x, na), \qquad (4.39)$$

como matéria-prima para a construção de uma família de operadores variacionais. Sua implementação obedece à seguinte prescrição iterativa

$$P^{(0)}(x) = \overline{L}(x)$$

$$P^{(n+1)}(x) = sign(u) \left[(1-\omega) |u| + \omega \langle P^{(n)} \rangle \right]$$

$$u = \frac{1}{2} \left[P^{(n)}(x-a) + P^{(n)}(x+a) \right],$$
(4.40)

onde ω é um parâmetro ajustável, escolhido no intervalo (0, 1). Logo, empregando esta família de operadores com o método variacional apresentado, extrairemos (vide próximo capítulo) as massas de blindagem correspondentes a excitações escalares¹⁵ — $J^P = 0^+$ — da fase desconfinada da teoria.

4.6 Breve introdução à dinâmica de tempos curtos

Como já mencionamos anteriormente, as simulações de Monte Carlo são a única forma numérica de resolver integrais funcionais muldi-dimensionais como (4.2). Mesmo assim, as suas intrínsecas propriedades de convergência — como a presença do fenômeno do frenamento crítico — tornam-nas extremamente lentas. Ou seja, muito embora novos algoritmos possam consistir em paliativos ao problema, ainda existe a necessidade de uma quebra de paradigma computacional, especialmente quando consideramos o caso da QCD completa (não-quenched).

Em outro contexto, expoentes críticos de sistemas de spins foram obtidos por meio de uma técnica de MC radicalmente diferente [39] — a dinâmica de tempos curtos (DTC) — que, em casos particulares, é promissora substituta dos convencionais métodos de MC. Isto porque técnicas de DTC exploram a constatação de que alguns comportamentos de escala [39], tradicionalmente atribuídos aos regimes de equilíbrio, já se apresentam nas fases transientes das simulações, o que permite a extração de física (relevante) a partir do estudo da evolução (transiente) do sistema.

¹⁵Aqui, utilizamos a nomenclatura $J^P = 0^+$ devido à semelhança funcional entre os operadores $P^{(n+1)}(x,y)$ — empregados em [33] — com os nossos (4.40).

CAPÍTULO 4. SIMULAÇÕES NUMÉRICAS

Recentemente, foi proposta [40, 41] uma adaptação das técnicas de DTC às simulações de QCD. Sua principal motivação baseia-se no fato de que, inexistindo a necessidade de longas termalizações, os efeitos de frenamento crítico e de tamanhos finitos (das redes) devem ser desprezíveis. Portanto, o estudo das classes de universalidade — estáticas e dinâmicas — entre teorias de gauge e sistemas de spins receberia um novo e poderoso aliado teórico.

Basicamente, todas as etapas envolvidas na aplicação da dinâmica de tempos curtos às simulações de Monte Carlo podem ser resumidas no seguinte procedimento algoritmico:

- Inicia-se o gerador de números aleatórios com uma nova semente.
- Cria-se uma configuração inicial aleatória (**K**) do sistema, ou seja, todas as variáveis de elo $U_{\mu}(\vec{r})$ da rede são escolhidas aleatoriamente em SU(2).
- Um pequeno valor médio (previamente escolhido) para o parâmetro de ordem (3.20) deve ser exatamente obtido, por exemplo, mediante uma re-configuração determinística¹⁶ de certos elos $U_{\mu}(\vec{r})$ escolhidos em posições \vec{r} aleatórias (para não introduzir correlações espúrias).
- A nova configuração inicial (K') produzida na última etapa é então evoluída, com um algoritmo de termalização, durante um pequeno número P de passos. Em cada um desses passos são efetuadas as medidas das grandezas de interesse físico (e.g. L), que têm seus valores armazenados em um acumulador.
- Salta-se novamente ao primeiro passo (para coletar mais dados), ou encerra-se a simulação com o cálculo das médias dos acumuladores.
- Por fim, deve ser graficada a evolução temporal das médias cálculadas e devem ser extraídos os comportamentos (funcionais) dos transientes.

Destacamos também que em simulações de DTC, nas imediações da temperatura crítica, existe a possibilidade de extrairmos do sistema, além dos tradicionais expoentes críticos, uma nova classe de expoentes dinâmicos. Estes, por sua vez, apresentam certos comporta-

¹⁶Por exemplo, impondo-se uma transformação local ao elo $U_{\mu}(\overrightarrow{r})$ como $U_{\mu}(\overrightarrow{r}) \rightarrow L_{\overrightarrow{r}}^{\dagger}U_{\mu}(\overrightarrow{r})$, que implica na mudança local $Tr[L(\overrightarrow{r})] \rightarrow \pm Tr[U_{\tau}(\overrightarrow{r})]$ do valor do loop de Polyakov (no ponto \overrightarrow{r} do plano xy).

mentos de escala atualmente bem estabelecidos, que podem ser extraidos com a medição (na fase transiente) das seguintes quantidades 17

• Magnetização: $M(t) = \frac{1}{N^2} \sum_{\overrightarrow{n}} \langle L_{\overrightarrow{n}}(t) \rangle \rightarrow \text{comportamento de escala:}$

$$M(t) \sim m_0 t^{\theta}. \tag{4.41}$$

• Autocorrelação: $A(t) = \frac{1}{N^4} \sum_{\overrightarrow{n}} \langle L_{\overrightarrow{n}}(t) L_{\overrightarrow{n}}(0) \rangle \rightarrow \text{comportamento de escala:}$

$$A(t) \sim t^{-\frac{d}{z}+\theta}.$$
(4.42)

• (Magnetização)²: $M^2(t) = \frac{1}{N^4} \left\langle \left(\sum_{\overrightarrow{n}} L_{\overrightarrow{n}}(t) \right)^2 \right\rangle \rightarrow \text{comportamento de escala:}$

$$M^2(t) \sim m_2 t^{\frac{1}{z}(d-2\frac{\beta}{\nu})}.$$
 (4.43)

onde m_0 é a magnetização inicial — i.e. é o valor médio pré-estabelecido do loop de Polyakov — na rede, θ e z são expoentes dinâmicos, d é a dimensão do sistema e β/ν é uma razão entre expoentes críticos de equilíbrio. Note ainda que $\langle \cdot \rangle$ denota média sobre configurações iniciais — provenientes de sementes independentes — ao contrário de uma média tomada ao longo do tempo de MC.

¹⁷Dado que esta técnica proveio de estudos de sistemas de spin, é convencional a adoção da tradicional notação de sistemas magnéticos mesmo em simulações de teorias de gauge [40].

Capítulo 5

Resultados das Simulações

Vos calcus sont corrects mais votre physique est abominable — de A. Einsten a G. Lemaître, 1918.

5.1 Parte I: estudo comparativo de algoritmos

Nesta seção apresentamos os resultados de nossos estudos comparativos dos algoritmos de termalização discutidos na seção 4.2. Para que a análise numérica efetuada fosse o mais precisa possível utilizamo-nos de dois modelos físicos exatamente solúveis, a saber: o modelo de spins O(4) [55, 60] unidimensional e a teoria quântica de campos de YM SU(2) [25, 61] em duas dimensões.

5.1.1 Análise do Modelo O(4) sem campo magnético

O modelo O(4) — descrito nos apêndices — é um excelente laboratório computacional para os nossos propósitos, pois proporciona simulações relativamente rápidas, cujas principais rotinas — como a de termalização — são integralmente transplantáveis para o caso da teoria de YM. Os programas desenvolvidos nessa sub-seção foram codificados em Fortran 77, sua compilação foi realizada no compilador f77; nativo do sistema operacional Linux, com a opção de optimização (-O3); o tempo total computacional foi de cerca de 211 horas/cpu em uma estação Alpha 64 bits, com 4 processadores de 250 MHz, 2 GB de memória RAM e 10 GB de disco rígido.

Foram codificadas rotinas para a termalização do Modelo de Spins O(4) utilizando os algoritmos de Banho-térmico, Overheat Bath e Banho-térmico modificado. Todos os

algoritmos foram posteriormente associados a uma rotina microcanônica, a fim de que pudéssemos mensurar o seu real impacto sobre o desempenho das simulações.

Os programas foram depurados comparando os resultados numéricos dos observáveis (7.4) e (7.5) — medidos para diversas redes e acoplamentos — com resultados exatos ou provenientes de outras simulações [55]. Para tal, mantivemos um razoável compromisso entre os tempos de computação e a precisão numérica necessária a este estudo, o que foi conseguido efetuando-se 5.000 varreduras para a termalização inicial da rede, seguidas de mais 500.000 iterações para a tomada de dados.

Precisas estimativas dos erros asseguraram que estes fossem mantidos entre 0,2 % e 1,5% para o observável (7.4) e em um intervalo entre $1, 5 \cdot 10^{-5}$ % e $0, 5 \cdot 10^{-2}$ % para o observável (7.5). Já os erros das quantidades $\tau_{int,\chi}$ e $\tau_{int,E}$ foram calculados — utilizando a técnica da Janela Auto-consistente — e mantiveram-se, respectivamente, entre [2, 13]% e [0.9, 1.4]%.

Dentro da margem de erro estipulada todos os algoritmos analisados produziram resultados em pleno acordo com as soluções exatas. Constatamos contudo uma peculiar anomalia sofrida pelo algoritmo de Overheat Bath, que promoveu termalizações apenas a partir de *hot starts* — i.e. configuração inicial de spins aleatória — falhando completamente quando são utilizados *cold starts*.

Finalmente, graficamos todos os observáveis medidos, compreendidos na região de física constante [55] onde $\frac{\beta}{Tamanho} \frac{\beta}{da \ Rede} = \frac{10}{128}$. Em especial, os tempos de correlação dos observáveis (7.4) e (7.5) foram graficados contra o tamanho das redes, a fim de que pudéssemos ajustar expressões analíticas do tipo: leis de potência dependentes do tamanho das redes. Estes Ansätze de escala, por sua vez, permitiram-nos a obtenção de uma específica classe de expoentes dinâmicos (os indicadores de desempenho dos algoritmos).

Observáveis medidos com os algoritmos de Banho-Térmico e Overheat Bath

Para uma avaliação comparativa do algoritmo de Overheat bath, foi decidido confrontá-lo inicialmente apenas com o tradicional algoritmo de Banho-Térmico e posteriormente incluir também algumas varreduras microcanônicas. O espaço de parâmetros foi esquadrinhado minuciosamente; tomamos 3 tamanhos distintos de redes: 128, 256 e 512 sítios, para 12 valores de β regularmente espaçados, respectivamente entre: [10,120], [20,240] e [40,480].

Usando a metodologia de comparar todos os resultados numéricos entre si e com as soluções exatas [55, 60], nos foi possível depurar eficientemente as rotinas de termalização e de análise dos erros estatísticos. Nesse ponto, pudémos evidenciar sobremaneira a utilidade do mecanismo microcanônico na redução dos erros estatísticos, o que é refletido na redução do tamanho das barras de erro dos observáveis mensurados.

A seguir, exibimos os resultados numéricos dos observáveis calculados em nossas simulações; barras de erro são muitas vezes imperceptíveis.



Figura 5.1: Modelo O(4) em 1d (128 sítios), observável: energia por spin.



Figura 5.2: Modelo O(4) em 1d (256 sítios), observável: energia por spin.



Figura 5.3: Modelo O(4) em 1d (512 sítios), observável: energia por spin.



Figura 5.4: Modelo O(4) em 1d (128 sítios), observável: susceptibilidade magnética.



Figura 5.5: Modelo O(4) em 1d (256 sítios), observável: susceptibilidade magnética.



Figura 5.6: Modelo O(4) em 1d (512 sítios), observável: susceptibilidade magnética.

Observáveis medidos com o algoritmo de Banho-Térmico Modificado

A avaliação comparativa da nova versão do algoritmo de Banho-térmico foi feita confrontandoa com a solução exata para os respectivos observáveis. No mesmo espírito das simulações precedentes, incluímos também algumas varreduras microcanônicas e esquadrinhamos o espaço de configurações com os mesmos parâmetros já utilizados anteriormente.

Observamos ainda que a modificação operacional que efetuamos no algoritmo de HB — i.e. a troca do sinal das raízes em (4.18) — tem uma taxa de aceitação de $50, 0 \pm 0, 1$ %, compatível portanto com os argumentos de isotropia e homogeneidade das direções em S^3 .

Os resultados obtidos são apresentadaos a seguir, barras de erro são muitas vezes imperceptíveis:



Figura 5.7: Modelo O(4) em 1d (128 sítios), observável: energia por spin.



Figura 5.8: Modelo O(4) em 1d (256 sítios), observável: energia por spin.



Figura 5.9: Modelo O(4) em 1d (512 sítios), observável: energia por spin.



Figura 5.10: Modelo O(4) em 1d (128 sítios), observável: susceptibilidade magnética.



Figura 5.11: Modelo O(4) em 1d (256 sítios), observável: susceptibilidade magnética.



Figura 5.12: Modelo O(4) em 1d (512 sítios), observável: susceptibilidade magnética.

Comparação de desempenho

Nesta etapa calculamos os tempos de correlação referentes aos observáveis mensurados nas simulações anteriores, aos quais acrescentamos também àqueles obtidos de uma nova simulação — feita apenas para $\beta = 80$ em uma rede de 1024 sítios. Posteriormente, escolhemos uma faixa de parâmetros — $\frac{\beta}{Tamanho da Rede} = \frac{10}{128}$ — que nos forneceu a região de física constante para a coleta dos dados empregados nesta análise de desempenho.

A estes dados ajustamos a seguinte curva: $\tau_{int,O} = a \cdot [Tamanho Linear da Rede]^b$, motivados pela hipótese de FSS de que o tempo de correlação é proporcional a uma potência do tamanho linear da rede. O Ansatz empreendido ajustou-se perfeitamente bem aos dados utilizados, o que corroborou com a hipótese inicial de escala.

Nossos resultados mostraram claramente que — nos regimes em que é aplicável — o algoritmo de Overheat Bath apresenta os menores valores para o expoente b, sendo portanto o mais eficiente dos algoritmos analisados. Entretanto, o gráfico para $\tau_{int,O}$ vs. tamanho da rede deste algoritmo evidência um comportamento *sui generis*, pois, apesar de indicar um coeficiente $b_{\tau int,E} = 0.00 \pm 0.01$ seus tempos de correlação são extremamente elevados se comparados aos algoritmos de HB e MHB, o que se deve a um enorme coeficiente a.

Por outro lado, também graficamos $\tau_{int,\chi}$ vs. tamanho da rede para todos os algoritmos e efetuamos regressões com o mesmo Ansatz funcional, mas, nesta análise nenhuma "anomalia" foi constatada, mesmo quando tratamos de OhB (que se monstrou, neste caso, o mais eficiente dos métodos de termalização). Vale ainda notar que estes últimos resultados sofrem sensível modificação com a inclusão de varreduras microcanônicas, haja vista que estas provocam notável declínio nos tempos de correlação. É de se observar que esta análise permitiu detectar uma razoável superioridade, no que tange à velocidade de descorrelação, do algoritmo de MHB em relação a versão usual do HB.

Os gráficos a seguir sumarizam as marcas alcançadas neste teste pelos diferentes algoritmos; suas respectivas tabelas trazem os coeficientes dos ajustes ao Ansatz analítico $\tau_{Int} = a \cdot L^b$:



Figura 5.13: Análise comparativa de desempenho, modelo O(4) 1d, observável: tempo de correlação da energia.

Passos	HB		MHB		OhB	
Microcanônicos	a	b	a	b	a	b
0	0.139(8)	0.99(5)	0.09(6)	1.32(5)	10.8(9)	0.00(1)
1	1.04(5)	0.124(8)	0.107(7)	1.18(5)	10.5(9)	0.00(1)

Table 5.1: Análise comparativa de desempenho, modelo O(4) 1d, resultados do ajuste numérico $\tau_{int,E} = a \cdot L^b$ aos resultados computacionais.



Figura 5.14: Análise comparativa de desempenho, modelo O(4) 1d, observável: tempo de correlação da susceptibilidade magnética. Dentre os observáveis, este é o de decaimento temporal mais lento.

Passos	HB		MHB		OhB	
Microcanônicos	a	b	a	b	a	b
0	0.0009(2)	2.08(5)	0.009(1)	1.95(3)	0.0048(5)	1.33(2)
1	0.011(1)	1.16(2)	0.015(1)	1.14(1)	0.022(2)	0.93(1)
2	0.016(1)	1.04(1)	0.015(1)	1.01(1)	0.032(2)	0.83(2)

Table 5.2: Análise comparativa de desempenho, modelo O(4) 1d, resultados do ajuste numérico $\tau_{int,\chi} = a \cdot L^b$ aos resultados computacionais.

5.1.2 Análise do Modelo O(4) com campo magnético

Tendo em vista a anomalia no algoritmo de OhB — devida ao uso de partidas frias — que foi encontrada nas simulações da última sub-seção, decidimo-nos por refazer parte daquelas simulações, empregando agora — a partir de hot starts — um campo magnético sobre o sistema. A motivação para estes estudos é simples, uma vez que um campo magnético externo privilegiará uma das direções espaciais — no espaço interno S^3 — quaisquer algoritmos não-ergódicos poderão ser afetados, gerando resultados díspares daqueles produzidos por seus congêneres ergódicos. No caso de OhB este fato seria bastante plausível, especialmente para o observável energia, já que este produziu tempos de correlação anormalmente elevados nas análises precedentes.

Campo	HB	MHB	OhB	
Externo.	$\langle Energia \rangle$	$\langle Energia \rangle$	$\langle Energia \rangle$	
100	0.9998766(1)	0.9998767(3)	0.9998793(2)	
200	0.9999484(1)	0.9999484(3)	0.9999409(1)	
300	0.9999727(1)	0.9999727(2)	0.9999681(2)	
400	0.9999849(1)	0.9999850(2)	0.9999794(2)	

Abaixo, resumimos os resultados encontrados. Note contudo, que para o modelo O(4)não há solução exata na presença de campo magnético externo.

Table 5.3: Análise de algoritmos: modelo O(4) 1d com campo magnético, observável: energia por spin; 50.000 iterações, 5.000 varreduras iniciais, $\beta = 200$, L = 64.

Campo	HB	MHB	OhB	
Externo.	$\langle \chi angle$	$\langle \chi angle$	$\langle \chi angle$	
100	63.99216(2)	63.992158(8)	63.99216(1)	
200	63.996746(7)	63.996745(7)	63.996735(7)	
300	63.998293(7)	63.998293(7)	63.99826(1)	
400	63.999071(7)	63.999071(7)	63.99906(1)	

Table 5.4: Análise de algoritmos: modelo O(4) 1d com campo magnético, observável: susceptibilidade magnética; 50.000 iterações, 5.000 varreduras iniciais, $\beta = 200$, L = 64.

Comentários

Nitidamente — na presença de intensos campos magnéticos externos — os observáveis do sistema de spins O(4), calculados por meio do algoritmo de Overheat Bath apresentam grandes divergências numéricas (em relação às barras de erro) com relação àqueles obtidos pelo uso do HB ou MHB. Este fato torna-se tanto mais evidente quanto mais intensos são os campos magnéticos aplicados. Portanto, o uso do OhB em sistemas de spins que apresentem transições de fase, e consequentemente magnetizações espontâneas, deve ser considerado temerário.

Análise da teoria de gauge de YM SU(2) em 2d 5.1.3

Confrontamos nesta sub-seção as consequências da adoção do novo algoritmo MHB ao invés do tradicional HB nas simulações computacionais de teorias de gauge [35]. O modelo aqui utilizado é a teoria de YM SU(2) em 2D, haja vista que este modelo permite um cálculo exato de seus observáveis físicos (confira apêndice), característica esta bastante útil na promoção de uma eficiente depuração dos códigos.

No limite de redes de lados infinitos, foi demonstrado [56] que o comprimento de correlação ξ é dado exatamente pelo inverso da tensão de corda κ , ou seja: $\xi=1/\sqrt{\kappa}$. Como estas grandezas também são inter-relacionadas ao acoplamento β da ação de Wilson (2.19) por

$$\xi = \frac{1}{\sqrt{\kappa}} = \sqrt{\frac{2\beta}{3}} \left[1 + \frac{1}{\beta} + O\left(\beta^{-2}\right) \right],$$

podemos propor tamanhos finitos de redes em que a razão entre β e L/ ξ minimize efeitos de tamanhos finitos¹, ao mesmo tempo em que fixe os intervalos de física constante.

Os códigos aqui desenvolvidos — em linguagem Fortran 77 e compilados com f77 (-O3) — visavam mensurar grandezas extensas — que em geral são intrinsecamente correlacionadas — como o loop de Wilson (2.35) de lado ξ , também chamado de plaqueta crítica, e o loop de Polyakov (3.20). Nessa fase, executamos simulações² produtivas por aproximadamente 70 horas/cpu, mensuramos os tempos de correlação de cada um dos observáveis e estimamos os seus erros (via Janela Auto-Consistente). Como de praxe, analisamos o desempenho computacional ajustando o Ansatz de lei de potências aos dados numéricos.

¹Adotamos aqui o valor $\beta = \frac{L^2}{32}$ – inspirados na Ref. [56] – o que implica na constância de L/ ξ . ²Em um Pentium III, 500 MHz, 256 Mb de memória RAM e 10GB de Disco Rígido.
Vale ainda notar que durante um mesmo tempo de execução, para redes com 72^2 ou 80^2 sítios, o algoritmo MHB produziu, se comparado ao tradicional HB, uma redução de até 45% nos tempos de correlação, o que implica redução de 25% nos erros estatísticos, e portanto, um considerável ganho de desempenho. Este fenômeno insinua a idéia que, em simulações computacionais paralelas — como aquelas executas em *clusters* — o ganho de eficiência pode ser ainda maior³.



Figura 5.15: Análise comparativa de desempenho, teoria de gauge SU(2) 2d — 15.000 Iterações, 5.000 varreduras iniciais — observável: tempo de correlação do loop de Polyakov.

 $^{^3\}mathrm{Devido},$ principalmente, à diminuição das comunicações inter-nós causadas pela adição de passos microcanônicos.



Figura 5.16: Análise comparativa de desempenho, teoria de gauge SU(2) 2d — 15.000 Iterações, 5.000 varreduras iniciais — observável: tempo de correlação da *plaqueta de lado crítico*.

5.2 Parte II: desconfinamento na teoria de YM SU(2) em 3d

Apresentaremos aqui os resultados obtidos em nossas simulações numéricas para a teoria de YM — na aproximação quenched — tridimensional a temperatura finita. Apesar de consideravelmente mais simples que a QCD, esta teoria já representa um considerável desafio computacional. Para evidenciá-lo, consideremos que apenas as simulações produtivas — apresentadas nessa seção — consumiram⁴ aproximadamente 1500 horas/cpu. Portanto, visando atingir uma maior eficiência, utilizamos o algoritmo de termalização MHB, desenvolvemos os códigos em Fortran 77 e os compilamos com o Intel Fortran r.2003 (-O3 -fast), o que resultou em uma redução de até 56% do tempo computacional. As barras de erros (estatísticos) apresentadas nesta seção, assim como nas precedentes, foram todas estimadas pelos métodos da seção 4.3; adicionalmente também efetuamos aqui certos estudos quantitativos de FSS.

 $^{^4\}rm Em$ processamento conjunto de um Pentium III, 500 MHz, 256 Mb de memória RAM e 10GB de Disco Rígido e de um Pentium IV, 2.0 GHz, 512 Mb de memória RAM e 80GB de Disco Rígido.

5.2.1 A transição de fase

Enquanto nas seções anteriores nossos códigos podiam ser depurados pela comparação com soluções exatas, a inexistência destas soluções — em 2+1 dimensões — teve de ser suprida comparando nossos resultados com os provenientes de outras simulações, como [57]. O observável de escolha para este procedimento foi o valor médio da plaqueta unitária (2.17), haja vista que este observável é calculável com precisões extremas, sendo pouco suscetível a efeitos de volume finito.

Por sua vez, os primeiros passos produtivos desta etapa de nosso trabalho consistiram na implementação de uma rotina que medisse — após certas varreduras iniciais de termalização — o valor médio do loop de Polyakov: <L>, ou seja

$$\langle L \rangle = \left\langle \sum_{\overrightarrow{r}} Tr \prod_{\tau=1}^{N_{\tau}} U_4\left(\overrightarrow{r}, \tau\right) \right\rangle, \tag{5.1}$$

pois esta quantidade, sendo um parâmetro de ordem, evidencia o comportamento crítico da transição de desconfinamento.

Nossas simulações foram efetuadas para diversos tamanhos de redes, variando-se o valor da constante de acoplamento da ação de Wilson (2.19). As redes foram preparadas tanto para partidas quentes como frias, um número de varreduras iniciais igual a 1000 foi o suficiente para garantir a independência dos resultados quanto às condições iniciais.

Muito embora para pequenas redes — com lados como 40 sítios — o comportamento de (5.1) já demonstrasse a presença da transição de desconfinamento, foram necessárias redes bastante maiores — com lados entre 80 e 100 sítios — para que pudéssemos notar uma destacada região crítica (em torno de $\beta = 6.50$), na qual as variações do parâmetro de ordem fossem bastante bruscas (apesar de contínuas⁵).

Assim, graças à marcante influência do tamanho das redes no comportamento de (5.1), consideramos que esta grandeza não pode prestar-se a uma precisa determinação — via extrapolações — da temperatura crítica do sistema para volumes infinitos. Esta tarefa só pôde ser cumprida utilizando-nos de outros métodos que serão expostos mais adiante. A seguir, apresentamos graficamente nossos resultados.

 $^{^5\}mathrm{O}$ que indica uma transição de fase de segunda ordem.



Figura 5.17: Plaqueta: curva contínua, sem pontos de inflexão. Não constatamos efeitos de volume finito.



Figura 5.18: Parâmetro de ordem: loop de Polyakov. Curva contínua com uma inflexão no intervalo $\beta \in [6.3, 6.6]$, que sugere a presença de um ponto crítico. Comportamentos quantitativamente distintos das curvas demonstram a presença de marcantes efeitos de volume finito.

5.2.2 Determinação da temperatura crítica

Uma precisa determinação da temperatura crítica de desconfinamento é essencial aos nossos estudos numéricos, haja vista que o procedimento de extração de expoentes críticos, que caracterizam as classes de universalidade, depende intrinsecamente desta temperatura. Para obtê-la, concentramo-nos em duas etapas. Numa etapa preliminar, onde o comportamento da susceptibilidade magnética do loop de Polyakov (4.32) foi sondado por rápidas simulações, em redes de tamanhos intermediários, de onde localizamos a região crítica observando o pico da susceptibilidade. A segunda etapa, que consistiu no cálculo numérico do cumulante de Binder de quarta ordem (seção 4.4), foi computacionalmente bastante custosa⁶. Basicamente, tal dispêndio de tempo reside na computação, para um grande conjunto de acoplamentos e tamanhos de redes, da quantidade (4.33), cujo ponto fixo resultante tem como abscissa o preciso valor crítico para o acoplamento β da ação de Wilson (2.19).



Figura 5.19: Suscetibilidade *Magnética*. Sugere possível comportamento divergente — a volume infinito — do parâmetro de ordem na região crítica, que aparece no intervalo de máxima curvatura: $\beta \in [6.5, 7.0]$.

⁶Da ordem de 400 horas/cpu no supra-referido Pentium III de 500MHz.



Figura 5.20: Método do cumulante de Binder. Permite uma máxima precisão na determinação do ponto crítico — $\beta = 6.50(5)$ — pois leva em consideração efeitos de volume finito: note que redes de lado menor que 40 não cruzam o ponto fixo. O valor obtido é compatível com $\beta = 6.52(3)$, encontrado em [37] com outros métodos.

Uma vez obtido o valor crítico do acoplamento também é possivel que se calculem os valores físicos da temperatura de transição de fase e do espaçamento de rede. Para isso, é essencial notar que em nossas simulações numéricas os únicos parâmetros ajustáveis são o acoplamento β — que depende implicitamente do espaçamento de rede a — e o número de sítios da rede. Portanto, parece natural que seja possível expressar quaisquer observáveis físicos como funções dos parâmetros de rede.

Assim, podemos associar ao valor — dimensional — experimentalmente mensurado de um observável físico, como a tensão de corda σ , a um valor — adimensional — determinado com as simulações na rede. Desse modo, são fixadas as escalas — e as dimensões físicas dos parâmetros livres.

Como exemplo, utilizamos a seguinte expansão [57] da tensão de corda em termos do parâmetro de redea

$$a \cdot \sqrt{\sigma \left(T=0\right)} = \frac{1,324(12)}{\beta} + \frac{1,20(11)}{\beta^2} + \dots, \tag{5.2}$$

onde $\sqrt{\sigma (T=0)}$ é a raiz da tensão de corda e — para a teoria de YM SU(2) em 3D — $\beta = 4/a \cdot g^2$. Substituindo nosso valor de β nessa expressão e utilizando um valor de

referência [3] $\sqrt{\sigma (T=0)} = 0,44 GeV$, extraímos o espaçamento de rede $a = 0,527 GeV^{-1}$ (i.e. a=0.104fm)⁷. Pela relação

$$T^{-1} = N_{\tau} \cdot a, \tag{5.3}$$

isto resulta, para $N_{\tau} = 4$ (como o adotado em nossas simulações), em uma temperatura de 474 MeV (i.e. $5.50 \cdot 10^{12}$ K) para a transição de desconfinamento.

5.2.3 Expoentes críticos estáticos e dinâmicos

Nesta sub-seção ocupamo-nos da extração dos expoentes críticos estáticos e dinâmicos que caracterizam a classe de universalidade a que pertence a teoria de YM SU(2) tridimensional. Para tal, concentramos nossos esforços computacionais em duas etapas distintas.

Na primeira, utilizamo-nos da hipótese de escala de tamanho finito (4.31) para que pudéssemos obter a razão entre os expoentes críticos de (3.4) e (3.5), ou seja, $\frac{\gamma}{\nu}$. As simulações foram conduzidas em redes com tamanhos que variaram de $10^2 \times 4$ a $100^2 \times 4$ sítios, coletamos os dados produzidos durante 50K varreduras de termalização (e mais 100K varreduras micro-canônicas) após as 5K varreduras iniciais. Uma regressão linear (em gráfico log-log) permitiu que obtivéssemos uma razão $\frac{\gamma}{\nu}$ — com um erro percentual de 2,8% — compatível com a classe de universalidade do modelo de Ising bidimensional.

Já na segunda etapa adaptamos os nossos códigos, usando uma nova rotina geradora de condições iniciais, para que pudéssemos efetuar simulações com dinâmica de tempos curtos (assim como foi prescrito na seção 4.6). Utilizamos aqui apenas o algoritmo MHB para as devidas varreduras de termalização — em número de 200 — tendo sido utilizadas 5K sementes diferentes para a preparação das configurações aleatórias iniciais.

Como os efeitos de volumes finitos são pouco importantes no contexto do uso das técnicas de DTC, restringimos nossas simulações à rede de tamanho $64^2 \times 2$ e ao valor do acoplamento crítico ($\beta = 3.43$) utilizados em [40], uma vez que estes se demostraram — segundo os métodos aplicados em [39] — situados dentro da região crítica⁸.

Vale ressaltar que a utilização de nosso novo algoritmo, em conjunto com as técnicas de DTC, ofereceu-nos uma nova possibilidade de depurar os códigos, bem como de constatar a forma pela qual a dinâmica de Monte Carlo influência a determinação dos expoentes

⁷Por conveniência adotamos o sistema natural de unidades: $\hbar = c = 1$ e utilizamos $\hbar \cdot c \simeq 3.16 \cdot 10^{-26} J \cdot m \simeq 197 MeV \cdot fm$ para inter-conversões.

⁸Nossos estudos evidenciam um comportamento de escala no intervalo $3.43 \leq \beta \leq 3.69$, o que corresponte a temperaturas físicas entre [451, 492] MeV. Sua média, $T_c \simeq 472 MeV$, está portanto em excelente concordância com aquela obtida pelo método do cumulante de Binder.

críticos dinâmicos. Graças às leis de escala (4.41), (4.42) e (4.43) obtivemos além da razão $\frac{\beta}{\nu}$ — entre os expoentes críticos estáticos (3.6) e (3.5) — os expoentes dinâmicos θ e z.

Por fim, notamos que apesar das grandes flutuações estatísticas do sistema em questão, os resultados aqui obtidos concordam suficientemente bem com a hipótese de que a teoria de YM SU(2) tridimensional — a temperatura finita — tenha o mesmo comportamento crítico universal (estático e dinâmico) do modelo de Ising bidimensional.

A seguir, apresentamos graficamente o resultado de nossas simulações.



Figura 5.21: Análise de FSS. Determinação da razão $\frac{\gamma}{\nu}$ entre expoentes críticos estáticos. Curva em vermelho: regressão obtida ajustando (4.35) aos dados computacionais.



Figura 5.22: Determinação da região crítica pelo método da Dinâmica de Tempos Curtos. No intervalo $\beta \in [3.43, 3.69]$ o comportamento é linear, sugerindo comportamento de escala por lei de potência.



Figura 5.23: Dinâmica de tempos curtos: comportamento do parâmetro de ordem <L> (loop de Polyakov). Em vermelho, regressão utilizando a lei de escala (4.41).



Figura 5.24: Dinâmica de tempos curtos: comportamento da Auto-Correlação. Em vermelho, regressão utilizando a lei de escala (4.42).



Figura 5.25: Dinâmica de tempos curtos: comportamento de $\langle L^2 \rangle$. Em vermelho, regressão utilizando a lei de escala (4.43).

	θ	Z	eta/ u	γ/ u
Ising 2D	0,191(01)	$2,\!155(03)$	$0,\!125$	1,75
SU(2) 3D	0,192(02)	$2,\!135(27)$	$0,\!120(18)$	
SU(2) 3D	0,19(1)	2,0(1)	0,14(2)	1,70(5)

Table 5.5: Sumário. Primeira e segunda linhas provêm das referências [27, 40] — respectivamente: solução exata e simulação de alta-precisão utilizando o algoritmo HB — A terceira linha refere-se aos valores obtidos em nossos estudos. Para o caso SU(2) temos θ , $z \in \beta/\nu$: determinação via DTC, γ/ν : determinado em equilíbrio térmico.

5.2.4 Potenciais inter-quarks

A possibilidade de calcular *ab initio* os potenciais inter-quarks, segundo a relação (3.23), é em princípio realizável através dos métodos numéricos empregados na presente subseção. Como um sutil alerta sobre nomenclatura elucidamos que — embora fisicamente inapropriado — designamos os graus de liberdade fundamentais da teoria de YM SU(2) por quarks e glúons, haja vista que esta nomenclatura é vastamente utilizada neste contexto.

Como em nossas simulações buscávamos uma exploração qualitativa dos potenciais inter-quarks — mediante uma ampla varredura do espaço de configurações da teoria portanto, optamos por utilizar uma rede suficientemente extensa — da ordem de alguns diâmetros nucleares — e efetuar 20K varreduras para a termalização (unicamente com o algoritmo MHB).

Optamos por omitir as barras de erro dos gráficos exibidos, visamos assim favorecer uma melhor percepção qualitativa do comportamento, a longas distâncias, dos potenciais envolvidos. Assim, podemos notar claramente os dois aspectos complementares — cada qual em uma fase distinta — dos potenciais a temperatura finita, a saber: confinamento linear (a baixas temperaturas) e blindagem/desconfinamento (a altas temperaturas).



Figura 5.26: Potenciais Inter-quarks a temperatura finita. Para $\beta < 6.10$ (i.e. T < 441 MeV) o potencial é linearmente confinante, para $6.20 < \beta < 6.50$ (i.e. 449 < T < 474 MeV) observamos progressivo enfraquecimento a longas distâncias e para $\beta > 6.50$ quarks e glúons desconfinam-se.

5.2.5 Massas de blindagem

Esta sub-seção exibe os resultados do que foi, indubitavelmente, a etapa computacional mais custosa de nossas investigações numéricas, haja vista que somente os cálculos produtivos — que originaram os gráficos aqui mostrados — consumiram cerca de 70% do tempo total dedicado à segunda etapa deste capítulo, ou seja, cerca de 1100 horas/cpu. Considerando que para a diagonalização de pequenas matrizes como (4.37) existem excelentes algoritmos numéricos — e.g. o método de Jacobi [48] — a maior parte dos nossos esforços computacionais foi empenhada na precisa determinação da família de operadores (4.40).

Nestas simulações utilizamos o acoplamento β no intervalo compreendido entre [6.50, 7.00], ou seja, nas vizinhanças da região crítica, adotamos também apenas o algoritmo MHB e redes de $50^2 \times 4$ sítios. Essa escolha permitiu que pudéssemos extrair extensas estatísticas — 1M de varreduras — para cada um dos oito operadores variacionais (4.40) definidos por $n \equiv 3k$, $k = 0, \ldots, 7$, o que se mostrou decisão bastante apropriada, permitindo que atingíssemos boa relação sinal/ruído, refletida na pequena dispersão dos dados.

CAPÍTULO 5. RESULTADOS DAS SIMULAÇÕES

Uma vez diagonalizadas as matrizes de correlação cruzada — calculadas entre os operadores variacionais anteriormente medidos — graficamos o comportamento espacial de seus auto-valores e ajustamos a curva teórica (4.38) aos dados. Evidenciamos aqui uma das marcantes características dos métodos variacionais: obtivemos com especial precisão numérica as massas de blindagem associadas aos estados fundamental e primeiro estado excitado, enquanto o segundo estado excitado apresentou-se bastante ruidoso.

A seguir, mostramos os resultados obtidos e suas consequências



Figura 5.27: Comportamento espacial dos três maiores auto-valores da matriz de correlação. Extração do espectro de massas de blindagem — $\beta \equiv \beta_c = 6.50$, rede $50^2 \times 4$, 1M Iterações — pelo ajuste da expressão (4.38) aos dados computacionais.



Figura 5.28: Comportamento espacial dos três maiores auto-valores da matriz de correlação. Extração do espectro de massas de blindagem — $\beta = 6.55 > \beta_c$, rede $50^2 \times 4$, 1M Iterações — pelo ajuste da expressão (4.38) aos dados computacionais.



Figura 5.29: Comportamento espacial dos três maiores auto-valores da matriz de correlação. Extração do espectro de massas de blindagem — $\beta = 7.00 \gg \beta_c$, rede $50^2 \times 4$, 1M Iterações — pelo ajuste da expressão (4.38) aos dados computacionais.

β	$a(GeV^{-1})$	Fundamental	1^o Excitado	2^o Excitado
6,50	0,5275	0,022(1)	0,042(1)	$0,\!09(3)$
6,55	0,5230	0,021(1)	0,040(1)	$0,\!09(3)$
7,00	$0,\!4855$	0,011(3)	0,024(8)	$0,\!08(2)$

Table 5.6: Massas de blindagem (adimensionais) para o estado fundamental e dois primeiros estados excitados, referentes à teoria de YM tridimensional na fase desconfinada, rede com $50^2 \times 4$ sítios.

Comentários

A precisão do cômputo das massas de blindagem dos potenciais na fase desconfinada mostra forte dependência com as flutuações térmicas envolvidas, o que pode ser facilmente evidenciado quando $\beta \geq 1,07\beta_c$. Neste caso, os respectivos estados excitados do sistema tornam-se visivelmente ruidosos e impossibilitam bons ajustes numéricos. Há portanto a necessidade de melhorias da relação sinal/ruído pelo acréscimo de passos de Monte Carlo.

Vale também notar que em nossas simulações as razões entre as massas dos primeiros estados excitados e fundamentais mantiveram-se em torno de 1,9(1) (para $\beta = 6,50$), enquanto para $\beta = 6,55$ obtivemos 2,2(3). Estes valores estão de acordo com os argumentos de universalidade, já que para o modelo de Ising bidimensional, que faz parte da mesma classe de universalidade de YM 3d, esta razão é exatamente igual a 2 [58, 59].

Capítulo 6

Conclusão

Se você não encontra o sentido das coisas é porque este não se encontra, se cria — Antoine Saint-Exupéry.

Esta dissertação foi dividida em duas etapas complementares. Na primeira, desenvolvemos, implementamos e confrontamos o desempenho de uma nova versão do algoritmo de banho-térmico — que se dedica à termalização em simulações de Monte Carlo — com as versões tradicionalmente adotadas nas simulações de sistemas de spins (contínuos) e teorias quânticas de gauge.

Nossa modificação não viola a ergodicidade — uma condição necessária a quaisquer algoritmos de termalização — e produziu, já no caso de computação serial, um decréscimo de aproximadamente 45% nos tempos integrados de correlação, equivalente a uma redução de cerca de 25% nos erros estatísticos. Considerando o fato de que simulações da QCD podem estender-se por meses, cremos que esta é uma colaboração importante à área.

Já na segunda etapa de nossas investigações, aplicamos este novo ferramental algorítmico ao estudo do fenômeno do desconfinamento de cor em teorias de gauge a temperatura finita. Abordamos o caso (particular) da teoria de Yang-Mills SU(2) — quenched — tridimensional, em que analisamos diversos tópicos relevantes à sua fenomenologia, por vezes (qualitativamente) semelhante à QCD.

Destacamos, por exemplo, a precisa determinação da temperatura crítica com a análise do cumulante de Binder de quarta ordem (uma abordagem original nesta área) e o estudo numérico da classe de universalidade estático/dinâmica (de YM 3d e de Ising 2d).

Neste último tópico, enfatizamos que certas propriedades da fase desconfinada (QGP), como razões entre massas de blindagem (envolvendo estados excitados) do espectro, puderam ser explicadas com base nos argumentos de universalidade propostos em [31].

Este resultado é fisicamente não-trivial, pois somente o estado fundamental contribui para a energia livre do sistema — base dos argumentos de universalidade [31]. Portanto, sua aplicação para a previsão de propriedades de estados excitados é uma extrapolação conceitual não óbvia, que pudémos verificar.

Capítulo 7

Apêndices

7.1 O modelo O(4) unidimensional

Os modelos O(N) pertencem à família dos sistemas de spins conhecidos por N-vetoriais, que é caracterizada pela presença de graus de liberdade contínuos, ou seja, cada um de seus "spins" é na verdade um vetor N-dimensional de norma unitária. Em particular, o modelo O(4) é bastante relevante para a física de altas energias, especialmente em sua versão tridimensional, que apesar de não ser exatamente solúvel, é conjecturada como estando na mesma classe de universalidade da transição de fase da QCD (completa) com dois sabores de férmions (leves).

Já a versão unidimensional do modelo O(4) possui solução exata [60], cujo detalhado estudo foge ao escopo deste trabalho. Salientaremos aqui somente algumas das principais características do modelo, citando, por exemplo, como expressar certas grandezas (e.g. energia e susceptibilidade) de interesse para os nossos estudos.

Uma vez que por meio da parametrização (4.8) a esfera quadridimensional de raio unitário S^3 é isométrica, enquanto variedade Riemanniana, ao grupo SU(2), é possível em princípio representar vetores unitários em R^4 como matrizes SU(2).

Usando esse princípio é definida uma hamiltoniana para um particular sistema de spins contínuos [modelo O(4)], os quais são vetores unitários sobre S^3 . Em uma rede unidimensional com L sítios tem-se

$$H(\mathbf{S}) = -\beta \sum_{x=1}^{L} \mathbf{S}_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{x+1}}.$$
(7.1)

Em simulações de Monte Carlo, seu passo de atualização é obtido utilizando-se a ação

para cada spin individual, a qual pode ser escrita por meio de um campo magnético efetivo como

$$H_{1-Spin}(\mathbf{S}) = -\beta \mathbf{S}_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{H}_{eff}.$$
(7.2)

Se for adotada a definição $\mathbf{H}_{eff} \equiv \mathbf{S}_{\mathbf{x}-1} + \mathbf{S}_{\mathbf{x}+1}$, e com a parametrização (4.8) de $S^3 \rightarrow SU(2)$, notamos claramente a semelhança entre (7.2) e de (4.11). Para garantir que a identificação seja exata, parametrizamos H_{eff} por meio de (4.9), o que garante que o produto escalar em (7.2) seja positivo-definido.

Por meio dessas identificações formais também fica claro que é permitido utilizarem-se as mesmas rotinas, tanto para as simulações da QCD SU(2) como para o modelo de spins apresentado. Notemos que em uma dimensão esse sistema não apresenta transições de fase. Portanto, a sua magnetização é sempre nula. Os principais observáveis, geralmente implementados em simulações computacionais, consistem em:

Magnetização:

$$\left\langle \overrightarrow{M}_{i} \right\rangle = \frac{1}{L} \left\langle \sum_{x=1}^{L} \mathbf{S}(\mathbf{x})_{\mathbf{i}} \right\rangle$$
(7.3)

Susceptibilidade Magnética:

$$\chi = \frac{1}{L} \left\langle \left(\sum_{x=1}^{L} \mathbf{S}(\mathbf{x}) \right)^2 \right\rangle$$
(7.4)

Energia:

$$E = \sum_{x=1}^{L} \mathbf{S}_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{x+1}}.$$
(7.5)

No caso unidimensional, no limite de uma rede infinita, são válidas as seguintes relações (em termos das funções "I" de Bessel) para cada uma das quantidades acima expostas Susceptibilidade Magnética:

$$\chi = \frac{1 + I_2(\beta) / I_1(\beta)}{1 - I_2(\beta) / I_1(\beta)}$$
(7.6)

Energia:

$$E = -\frac{1}{\beta} + \frac{I_0(\beta) + I_2(\beta)}{2I_1(\beta)}.$$
(7.7)

7.2 Teoria de YM SU(2) bidimensional

Delineamos aqui o método de resolução da teoria bidimensional de YM quenched em uma rede com N_S^2 sítios e condições de contorno livres, seguimos de perto as referências [61, 62] e apresentamos, como resultado geral, as soluções exatas para certas quantidades de interesse em nossos estudos numéricos.

O ingrediente fundamental para a solução é a função de partição

$$Z_W = \int [dU] \, e^{-S_W(U)},\tag{7.8}$$

escrita em termos da medida de Haar para o grupo SU(2)

$$dU = \frac{1}{\pi^2} \delta \left(u_0^2 + |\overrightarrow{u}|^2 - 1 \right) d^4 u$$
(7.9)

e da ação de Wilson para os campos de gauge

$$S_W = -\frac{\beta}{4} \sum_p S_P(x)$$

A ação por plaqueta S_P é escrita como

$$S_P = Tr \left[P_{01}(x) + P_{01}^{\dagger}(x) \right], \qquad (7.10)$$

em termos das variáveis de elos que constituem grampos do tipo

$$P_{01}(x) = U_0(x) U_1(x+\hat{0}) U_0^{\dagger}(x+\hat{1}) U_1^{\dagger}(x),$$

cuja simplificação pode se dar fixando o calibre com um gauge temporal (i.e. $U_0 = 1$),

nesse caso, temos

$$P_{01}(x) = U_1(x+\hat{0}) U_1^{\dagger}(x), \qquad (7.11)$$

o que reduz o problema de resolver um sistema bidimensional para a solução de vários sistemas unidimensionais (desacoplados).

Ou seja, com a introdução da seguinte transformação

$$U_1(x+\hat{0}) = W(x) U_1(x), \qquad (7.12)$$

fundamental na solução desse modelo, podemos fatorar a função de partição (7.8) tal que ela assuma a seguinte forma

$$Z(\beta) = \prod_{x} \int [dW] \exp\left(-\frac{\beta}{4} \sum_{x} \left[W + W^{\dagger}\right]\right) = z(\beta)^{N_{S}^{2}}.$$
 (7.13)

Como a resolução das integrais em (7.13) é um processo bastante tedioso [61], e que pode ser assistido por softwares algébricos (e.g. Maple), apresentaremos apenas o resultado final da computação, que é expresso em termos das funções "I" de Bessel

$$z\left(\beta\right) = 2\frac{I_1\left(\beta\right)}{\beta},\tag{7.14}$$

a partir da qual também podemos calcular o valor da "ação por plaqueta" da teoria, que é dado por $L_{1}(Q) = L_{1}(Q)$

$$w(\beta) \equiv \frac{dz(\beta)}{d\beta} = \frac{I_2(\beta)}{I_1\beta}.$$
(7.15)

Esta última quantidade é especialmente interessante, haja vista que guarda [62] uma simples relação numérica com o loop de Wilson (W)

$$W = \left[w\left(\beta\right)\right]^{RT},\tag{7.16}$$

onde RT é o número de plaquetas compreendidas no interior do trajeto de circuitação de W.

Referências Bibliográficas

- Do átomo Grego à Física das Interações Fundamentais. Ed. AIAFEX, 1994. Editores: F. Caruso e A. Santoro.
- [2] A. Einstein. The Meaning of Relativity. Princeton University Press, 1955.
- [3] D. H. Perkins. Introduction to High Energy Physics. Addison-Wesley Publishing Company Inc., 1987.
- [4] D. Griffiths. Introduction to Elementary Particles. John Wiley & Sons Inc., 1987.
- [5] R. Rosenfeld. Introduction to Standard Model. www.ift.unesp.br/users/rosenfeld/ seminars/swieca.ps
- [6] S. Weinberg. Gravitation and Cosmology: principles and applications of the general theory of relativity. Wiley, 1972.
- [7] K. Moriyasu. An Elementary Primer for Gauge Theory. World Scientific, 1983.
- [8] J.-Q. Chen. Group Representation Theory for Physicists. World Scientific, 1989.
- [9] G. Altarelli. A QCD Primer. p. 70-111 em New States of Matter in Hadronic Interactions, AIP Conference Proceedings vol. 613. Eds. H.-Thomas Elze et al, 2002.
- [10] T. Muta. Foundations of Quantum Chromodynamics. World Scientific, 1987.
- [11] M. Kaku. Hiperespaço. Ed. Rocco, 2000.
- [12] S. Weinberg. Sonhos de uma Teoria Final. Ed. Rocco, 1996.
- [13] L. Smolin. Três caminhos para a Gravidade Quântica. Ed. Rocco, 2002.
- [14] F. Karsch. Lattice QCD at Finite Temperature, p.112-141 em New States of Matter in Hadronic Interactions, AIP Conference Proceedings vol. 613. Eds. H.-Thomas Elze et al, 2002.

- [15] M. Creutz. Quarks Gluons and Lattices. Cambridge University Press, 1983.
- [16] K. G. Wilson. Confinement of quarks. Phys. Rev. D10 (1974) 2445.
- [17] H. Satz. Quark Gluon Plasma, ed R.C.Hwa, World Scientific, 1990.
- [18] G. Brumfield. Nature 430 (2004) 498.
- [19] J. Rafelski. Quark-Gluon Plasma and Strangeness. p. 142-167 em New States of Matter in Hadronic Interactions, AIP Conference Proceedings vol. 613. Eds. H.-Thomas Elze et al, 2002.
- [20] J. J. Sakurai. Advanced Quantum Mechanics. Addison-Wesly Publishing Company, Inc. ed. 11, 1987.
- [21] A. D. Linde. Infrared problem in the thermodynamics of the Yang-Mills gas. Phys. Lett B96 (1980) 289.
- [22] H. Rothe. Lattice Gauge Theories: an Introduction. World Scientific Lecture Notes in Physics - vol 43, 1992.
- [23] D. P. Landau e K. Binder. A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics. Cambridge University Press, 2000.
- [24] M. E. J. Newman e G. T. Barkema. Monte Carlo Methods in Statistical Physics. Oxford University Press, 2001.
- [25] I. Montvay e G. Münster. Quantum Fields on a Lattice. Cambridge University Press, 1994.
- [26] M. Henkel. Conformal Invariance and Critical Phenomena. Springer, 1999.
- [27] H.E. Stanley. Introduction to Phase Transition and Critical Phenomena. Clarendon Press, 1971.
- [28] Ma. Shang-Keng. Modern Theory of Critical Phenomena. W. A. Benjamin Inc, 1976.
- [29] A. Cucchieri. T. Mendes, A. R. Taurines e G. Travieso. Parallel implementation of a lattice-gauge-theory code: studying quark confinement on PC clusters. Anais do 15th Symposium on Computer Architeture and High Performance Computing. IEEE Computer Society 2003. pág. 123. hep-lat/0308005.
- [30] A.M. Polyakov. Thermal properties of gauge fields and quark liberation. Phys. Lett. B72 (1978) 477.
- [31] B. Svetitsky e L. G. Yaffe. Critical Behavior at finite-temperature confinement transitions. Nucl. Phys. B210 [FS6] (1982) 423.

- [32] K. Holland, M. Pepe e U.J. Wiese. The deconfinement phase transition of Sp(2) and Sp(3) Yang-Mills theories in 2+1 and 3+1 dimensions. Nucl. Phys. B694 (2004) 35.
- [33] R. Fiore, A. Papa e P. Provero. Spectrum of screening masses near Tc: predictions from universality. Phys. Rev. D67 (2003) 114508.
- [34] C. N. Yang e R. L. Mills. Conservation of Isotopic Spin and Isotopic Gauge Invariance. Phys. Rev. 96 (1954) 191.
- [35] A. Cucchieri, R. Frigori, T. Mendes e A. Mihara. More efficient thermalization of gauge fields in lattice QCD. Hadron 2004 proceedings, AIP 2004.
- [36] A. D. Sokal. Monte Carlo methods in statistical mechanics: foundations and new algorithms. Cargèse 1996, Integration: basics and applications, http://citeseer.nj.nec.com/sokal96monte.html
- [37] J. Engels, F. Karsch, E. Laermann, C. Legeland, M. Lütgemeier, B. Peterson e T. Scheideler. A study of finite temperature gauge theory in 2+1 dimensions. Nucl. Phys. Proc. Suppl. 53 (1997) 420.
- [38] M. Caselle, M. Hasenbusch e P. Provero. Non perturbative effects in 3D ϕ^4 theory. Nucl. Phys. B556 (1999) 575.
- [39] L. Schülke. Short-time critical dynamics. Proceedings of the international workshop on nonperturbative methods and lattice QCD, Guangzhou, 2000.
- [40] K. Okano, L. Schuelke e B. Zheng. Dynamic SU(2) lattice gauge theory at finite temperature. Phys. Rev. D57 (1998) 1411.
- [41] K. Okano e T. Otobe. Short-Time Scaling in SU(2) Lattice Gauge Theory at Finite Temperature. Nucl. Phys. B Proc. Suppl. 129 (2004) 829.
- [42] J. D. Jackson. Classical Eletrodynamics. John Wiley & Sons Inc., 1962.
- [43] M. Le Bellac. Quantum and Statistical Field Theory. Clarendon Press, 1994.
- [44] A. O. Barut e R. Raczka. Theory of Group Representations and Applications 2. ed. World Scientific, 1986.
- [45] M. Le Bellac. Thermal Field Theory. Cambridge University Press, 1996.
- [46] L. Susskind. Lattice models of quark confinement at high temperature. Phys. Rev D20 (1979) 2610
- [47] L. D. McLerran e B. Svetitsky. Quark liberation at high temperature: A Monte Carlo study of SU(2) gauge theory. Phys. Rev. D24 (1981) 450.

- [48] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling e B. P. Flannery. Numerical Recipes in Fortran. Cambridge University Press. ed. 2, 1992.
- [49] T. Tomé e M. J. de Oliveira. Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade. Edusp, 2001.
- [50] A.D. Kennedy e B.J. Pendlenton, Improved heatbath method for Monte Carlo calculations in lattice gauge theories. Phys. Lett. B156 (1987) 393.
- [51] M. Creutz. Microcanonical Monte Carlo Simulation. Phys, Rev. Lett. 50 (1983) 1411.
- [52] S. L. Adler. Algorithms for pure gauge theory. Nucl. Phys. B. (Proc. Suppl.) 9 (1989) 437.
- [53] R. Petronzio e E. Vicari. An overheat bath algorithm for lattice gauge theories. Phys. Lett. B254 (1991) 444.
- [54] A. S. Kronfeld. Improved methods for computing masses from numerical simulations. Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 17 (1990) 313.
- [55] T. Mendes e A. Sokal. Multigrid Monte Carlo method, IV, One-dimensional O(4)symmetric non-linear σ -model. Phys. Rev. D53 (1996) 3438.
- [56] A. Cucchieri e T. Mendes. Critical slowing-down in SU(2) Landau gauge-fixing algorithms. Nucl. Phys. B471 (1996) 263.
- [57] M. Teper. SU(N) gauge theories in 2+1 dimensions. Phys. Rev. D59 (1999) 014512.
- [58] A. Pelissetto e E. Vicari. Critical Phenomena and Renormalization-Group Theory. Phys. Rept. 368 (2002) 549.
- [59] G. Delfino. Integrable field theory and critical phenomena, the Ising model in a magnetic field. J. Phys. A37 (2004) R45.
- [60] A. Cucchieri, T. Mendes, A. Pelissetto e A. D. Sokal. Continuum limits and exact finite-size-scaling functions for one-dimensional O(N)-invariant spin models. J. Statist. Phys. 86 (1997) 581.
- [61] C.B. Lang, P. Solomonson e B.S. Skagerstam. A study of exactly solvable lattice gauge theories in two space-time dimensions. Phys. Lett. B100 (1981) 29.
- [62] A. Taurines. Comportamento infravermelho do propagador do glúon na rede. Tese de doutorado, IF-UFRGS, 2003.