

Universidade de São Paulo
Instituto de Física

Configurações Topológicas no Modelo Sigma Não-Linear $SO(2)$

Arnaldo Gomes de Oliveira Filho

Banca Examinadora

Prof. Dr. Jorge L. deLyra (IFUSP) - Orientador

Prof. Dr. Carlos Eugênio Imbassahy Carneiro (IFUSP)

Prof. Dr. Márcia Gonçalves do Amaral (IFUFF)

Dissertação apresentada ao
IFUSP para a obtenção do
grau de mestre em ciências.

Março de 1998

Resumo

Mostramos, por meio de simulações em redes euclidianas finitas e de uma extrapolação para o limite do contínuo, que as configurações quânticas típicas do modelo Sigma não-linear com simetria $SO(2)$ não apresentam caráter topológico bem definido nas proximidades do ponto crítico, para o qual deve tender qualquer limite do contínuo que possua relevância física.

Abstract

We show, by means of simulations on finite Euclidean lattices and of an extrapolation to the continuum limit, that the typical configurations of the non-linear Sigma model with $SO(2)$ symmetry do not have well-defined topological character near the critical point, to where any physically relevant continuum limit must tend.

Dedico este trabalho à Dona Juracy,
minha mãe.

Agradecimentos

Desejo agradecer a todos os que diretamente influenciaram em minha atual concepção da física:

Ao professor Dr. Jorge L. deLyra, que sempre deixou claras suas opiniões e críticas sobre a física moderna e demonstrou paciência e dedicação na apresentação do método científico;

Ao Professor Dr. Carlos Eugênio I. Carneiro, por suas valiosas contribuições ao nosso grupo de pesquisas, e aos demais colegas do grupo, Dr. André C. R. Martins, Silvana Perez e André B. Catalão, pelo companheirismo e suas várias sugestões;

Aos amigos João Luis M. Assirati, Alex Guerra, Carlos R. Rambo, Roberto Baginski B. Santos e Frank F. Sene por nossos incontáveis debates sobre os fundamentos e perspectivas da física;

Agradeço especialmente ao professor Dr. Paulo Teotônio Sobrinho por suas interessantes sugestões relativas a este trabalho.

O grande trabalho computacional desta dissertação foi efetuado em plataformas UNIX nos computadores do Departamento de Física Matemática (DFMA) do Instituto de Física da USP (IFUSP) e também no computador SP2-IBM do Laboratório de Computação Avançada da USP, aos quais agradeço. Todos os trabalhos de análise de dados e compilação de resultados foram realizados no DFMA-IFUSP com o uso de “free software” dos projetos LINUX e GNU. Os gráficos foram gerados pelos pacotes Gnuplot, Xvgr e Xfig; para a confecção tipográfica foi utilizado o software \LaTeX .

Sumário

1	Introdução	1
2	Teorias de Campos	3
2.1	Modelos Polinomiais Discretos	3
2.2	Teoria Quântica de Campos na Rede	5
2.3	O Modelo Sigma Não-Linear	7
3	Topologia das Configurações	10
3.1	Topologia no Modelo Clássico	10
3.2	Caso Quântico	12
4	Simulações Estocásticas	15
4.1	Algoritmos de Monte Carlo	15
4.2	Método de “Clusters” de Wolff	18
4.3	Descrição do Algoritmo	19
5	Resultados Numéricos	21
6	Conclusões e Perspectivas	25
A	Resultados Gráficos	26
A.1	Massas	26
A.2	Histogramas	28
A.3	Dispersões	36
B	Indução Alternativa dos Observáveis	39
C	Balanco Detalhado no Algoritmo de Wolff	44
	Referências	47

Capítulo 1

Introdução

Com o surgimento da Mecânica Quântica, na década de 1920, ficou evidente que o senso comum, baseado na experiência com a natureza clássica, é insuficiente para a compreensão da estrutura da matéria. Basta citar a perplexidade que nos causa a dualidade partícula-onda. O respaldo dado ao uso da intuição na busca de conhecimento objetivo fica cada vez mais condicionado à experiência do indivíduo com os aspectos formais da teoria. As discussões entre N. Bohr e A. Einstein sobre a interpretação dos fenômenos quânticos, capítulo brilhante da história da física, são um exemplo do nível de sofisticação a que podem chegar as “Gedankenexperiment” (do alemão, “experiências do pensamento”) para que seja realizada a leitura correta da teoria.

Que dizer então do desenvolvimento subsequente da Teoria Quântica de Campos? É particularmente surpreendente que da renormalização se obtenham resultados tão exatos para a Eletrodinâmica Quântica (QED), cujas previsões chegam a concordar em uma parte em 10^8 com os dados experimentais. Afinal, a renormalização tem seu sucesso restrito a um número pequeno de teorias. Entre as quatro forças da natureza, *forte, fraca, gravitacional e eletromagnética*, apenas esta última é descrita pela teoria de campos com boa precisão.

Muitas hipóteses de trabalho em teorias quânticas ainda são inspiradas, entretanto, em fenômenos observados classicamente, sem que haja alguma experiência capaz de verificar diretamente a validade dessas hipóteses. O formalismo da teoria de campos nas redes euclidianas oferece um laboratório de testes apropriado para esse tipo de avaliação, graças às simulações estocásticas em computadores. Com esse recurso, estudamos neste trabalho a possibilidade de existência de efeitos topológicos em um modelo da teoria quântica de campos.

Classicamente, demonstra-se que as configurações que correspondem aos mínimos da ação do modelo Sigma não-linear, com simetria $SO(2)$, apresentam topologias bem definidas. Estas configurações são organizadas em classes de homotopia, definidas por “winding numbers”. Baseado no fato de que as configurações dos campos quânticos são tipicamente descontínuas quando é tomado o limite do contínuo [1], o Prof. Jorge deLyra formulou a hipótese de que seria improvável a definição de qualquer topologia nesse limite. Para demonstrar essa hipótese, realizamos as simulações estocásticas do modelo Sigma na rede euclidiana com condições periódicas de contorno. Definimos, para tanto, observáveis que retornam os valores dos “winding numbers” em cada direção da rede

e que têm correspondência direta com os observáveis no contínuo quando da tomada desse limite. Medimos também a dispersão dos valores desses observáveis em cada configuração e verificamos que elas aumentam no limite do contínuo, descaracterizando qualquer topologia ao nos aproximarmos do ponto crítico. Esse fato está diretamente relacionado às fortes flutuações dos campos, características do ponto crítico.

Capítulo 2

Teorias de Campos

O grande sucesso da QED é devido ao processo de “renormalização perturbativa”, em que os termos divergentes das expansões são incorporados pelas constantes de acoplamento e massas da teoria. Em 1971, G. 't Hooft [2] mostrou que as teorias de “gauge” (ou de “calibre”) também são renormalizáveis, dando impulso à Cromodinâmica Quântica (QCD), uma forte candidata à teoria das interações fortes. Mas, nesse caso, a renormalização perturbativa não é tão bem sucedida, pois a constante de acoplamento da teoria é muito maior do que o da QED (~ 14). Em 1974, Kenneth G. Wilson [3] fez a descrição de uma teoria de gauge em quatro dimensões numa rede discreta, com a qual se eliminam problemas de divergência ultravioleta e se permite a obtenção de resultados não-perturbativos. Formulações deste tipo, em que as integrais divergentes são feitas finitas durante os estágios intermediários dos cálculos, são usualmente classificadas como métodos de “regularização”. Deve ressaltar-se que a renormalização é independente do processo de regularização, do qual não devem depender os resultados finais.

Na ausência de soluções analíticas para problemas da QCD e dadas as dificuldades com a teoria de perturbações, as teorias na rede têm se mostrado uma alternativa bastante viável, graças ao uso de simulações estocásticas em computadores. Nosso grupo de pesquisas tem se utilizado dessas técnicas para a investigação de vários fenômenos no âmbito dos campos escalares, como quebra de simetria, problemas de condições de contorno, expoentes críticos, entre outros, visando a extrapolação dessas ferramentas para modelos de maior relevância física, como a Eletrodinâmica Quântica.

Nas seções seguintes são apresentados os modelos escalares e a formulação da teoria na rede euclidiana conforme utilizados no presente trabalho.

2.1 Modelos Polinomiais Discretos

A rede euclidiana é usualmente definida como um conjunto de pontos equidistantes, chamados genericamente “sítios”, num espaço-tempo de d dimensões, ligados entre si por segmentos que se denominam “links”, conforme é ilustrado na figura (2.1) o caso $d = 2$. Classicamente, define-se externamente um comprimento físico L para cada dimensão, estabelecendo-se o volume L^d para uma rede hipercúbica de d dimensões.

O comprimento a de cada link, que corresponde ao espaçamento da rede, é dado por $a = L/N$, sendo N o número de pontos na borda da rede, ditos “vértices”, e N^d o número total de pontos da rede.

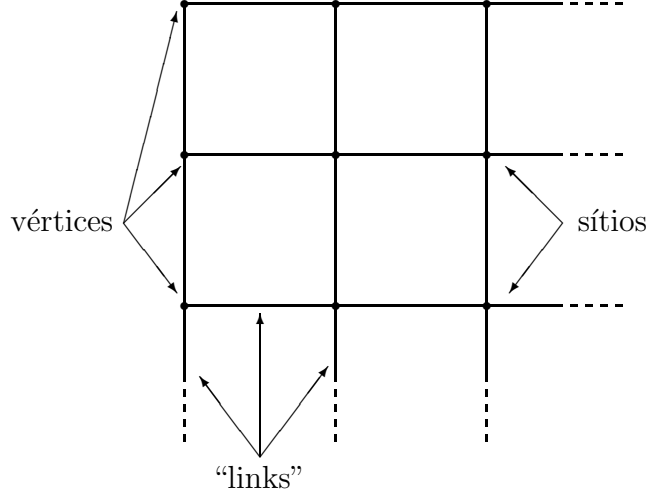


Figura 2.1: Desenho esquemático de uma rede em duas dimensões.

Na rede, os campos assumem valores sobre os sítios, satisfazendo os vínculos e a dinâmica determinada pela ação S do modelo. Os campos também podem apresentar \mathcal{N} graus de liberdade no espaço interno, de acordo com o grupo de simetria do modelo. Sendo a rede finita, o número de graus de liberdade do sistema é finito e é dado pelo produto do número de sítios pelo número de dimensões do grupo de simetria, $N^d \mathcal{N}$. As derivadas dos campos correspondem a diferenças finitas entre sítios ligados por um link.

Dada a ação que descreve um certo modelo na rede, a ação clássica pode ser recuperada tomando-se o limite do contínuo, desde que haja sido estabelecida a escala externa, o que define a distância entre dois pontos da rede. Tome-se, por exemplo, o modelo escalar $\lambda\varphi^4$, cuja ação é descrita por

$$S_N = \frac{1}{2} \sum_{\ell}^{dN^d} \Delta_{\ell} \vec{\varphi} \cdot \Delta_{\ell} \vec{\varphi} + \frac{\alpha}{2} \sum_s^{N^d} \vec{\varphi} \cdot \vec{\varphi} + \frac{\lambda}{4} \sum_s^{N^d} (\vec{\varphi} \cdot \vec{\varphi})^2 - \sum_s^{N^d} \vec{J} \cdot \vec{\varphi}. \quad (2.1)$$

O parâmetro λ é a constante de acoplamento e α é o parâmetro de massa do modelo. A soma $\sum_{\ell}^{dN^d}$ é efetuada sobre todos os dN^d links da rede, $\Delta_{\ell} \vec{\varphi}$ é a diferença finita entre os campos de sítios vizinhos ligados por um link, $\sum_s^{N^d}$ representa uma soma sobre todos os N^d sítios da rede, $\vec{\varphi} \cdot \vec{\varphi} = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} \varphi_i \varphi_i$ indica o produto escalar sobre o espaço interno dos campos e \vec{J} é uma fonte externa.

Para se proceder à passagem ao limite, definem-se as grandezas dimensionais para o campo, $\vec{\phi} = \vec{\varphi} a^{(2-d)/2}$, para a massa quadrada, $m^2 = \alpha a^{-2}$, para a constante de acoplamento $\Lambda = \lambda a^{d-4}$, e para a fonte externa, $\vec{J} = \vec{j} a^{-(d+2)/2}$. Por questão de

conveniência, separam-se as somas sobre os links em somas sobre os sítios s e sobre as direções μ do espaço-tempo, $\sum_{\ell}^{dN^d} = \sum_s^{N^d} \sum_{\mu}^d$. A ação resultante é

$$S_N = \sum_s^{N^d} a^d \left[\frac{1}{2} \sum_{\mu}^d \frac{\Delta_{\mu} \vec{\phi}}{a} \cdot \frac{\Delta_{\mu} \vec{\phi}}{a} + \frac{m^2}{2} \vec{\phi} \cdot \vec{\phi} + \frac{\Lambda}{4} (\vec{\phi} \cdot \vec{\phi})^2 - \vec{J} \cdot \vec{\phi} \right]. \quad (2.2)$$

Agora pode ser tomado o limite do contínuo mantendo-se L fixo e impondo-se $N \rightarrow \infty$, ou seja, faz-se $a \rightarrow 0$. Isso corresponde à substituição das diferenças discretas por derivadas e da soma pela integral,

$$\begin{aligned} \frac{\Delta_{\mu} \phi}{a} &\rightarrow \partial_{\mu} \phi, \\ \sum_s a^d &\rightarrow \int d^d x, \end{aligned} \quad (2.3)$$

do que se obtém

$$S[\phi] = \int d^d x \left[\frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^d \partial_{\mu} \vec{\phi} \cdot \partial_{\mu} \vec{\phi} + \frac{m^2}{2} \vec{\phi} \cdot \vec{\phi} + \frac{\Lambda}{4} (\vec{\phi} \cdot \vec{\phi})^2 - \vec{J} \cdot \vec{\phi} \right]. \quad (2.4)$$

2.2 Teoria Quântica de Campos na Rede

As Teorias de Campos são usualmente descritas no espaço de Minkowski, o que reflete seu caráter relativístico. No entanto, para que seja possível a realização das simulações estocásticas, definem-se as teorias no espaço euclidiano, estabelecendo-se a conexão com a mecânica estatística. Ao se fazer o tempo complexo por uma substituição do tipo $it \rightarrow \tau$, a ação é euclidianizada e o termo e^{iS} da integral funcional usual [4] passa a ser e^{-S_N} , que corresponde ao “ensemble” estatístico do qual se extrai a função de partição do sistema.

Assim, as grandezas relevantes para a teoria são dadas pelos valores esperados de observáveis \mathcal{O} , que por sua vez são funções dos campos φ ,

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\int [d\varphi] \mathcal{O}[\varphi] e^{-S_N[\varphi]}}{\int [d\varphi] e^{-S_N[\varphi]}}, \quad (2.5)$$

em que

$$[d\varphi] = \prod_s^{N^d} \prod_i^{\mathcal{N}} d\varphi_i(s).$$

A integração múltipla é efetuada sobre todos os sítios e todas as componentes dos campos. Para retornar à Teoria de Campos contínua e lorentziana, toma-se o limite do contínuo e faz-se a extensão analítica dos observáveis.

Para a obtenção das informações físicas do sistema são fundamentais as funções de Green. Elas podem ser obtidas pela extensão analítica das correspondentes funções de correlação medidas na rede. A função de correlação de um ponto, $g_i^{(1)}(s) = \langle \varphi_i(s) \rangle$,

é a magnetização do campo, ao passo que a função de dois pontos, $g_i^{(2)}(s_1, s_2) = \langle \varphi_i(s_1)\varphi_i(s_2) \rangle$, é usada para a obtenção da massa renormalizada.

A rede pode ser vista como um “recorte” do espaço-tempo, de modo que sua borda permanece em contato com o restante do sistema. Para que se incluam os efeitos do restante do sistema sobre a rede, devem ser implementadas condições de contorno condizentes com a situação. Condições de contorno fixas, por exemplo, podem representar a influência do valor médio do campo fora da rede sobre ela, como uma relação de autoconsistência. Para as medidas relativas à topologia realizadas neste trabalho, são necessárias condições periódicas de contorno, em que o último sítio de uma linha numa dada direção é unido por um link adicional ao primeiro dessa mesma linha. Dessa forma, o campo clássico pode apresentar uma configuração contínua fechada. Condições periódicas são usualmente implementadas para que a rede apresente invariância translacional.

Um aspecto importante é que há um único parâmetro dimensional na teoria, que pode ser tomado como função do espaçamento da rede a . Logo, o cálculo de grandezas dimensionais como a massa m deve resultar, por exemplo, em $m = 1/(a\xi)$, sendo ξ o comprimento de correlação. Para que a massa permaneça finita quando $a \rightarrow 0$, é necessário que $\xi \rightarrow \infty$, ou seja, deve-se tomar o limite para o ponto crítico da teoria.*

Não há, no entanto, quebra de simetria em redes periódicas finitas, de forma que os valores esperados dos observáveis variam suavemente com os parâmetros da teoria. Mas ao se aumentar o tamanho da rede, as curvas dos observáveis ficam mais próximas das curvas do sistema contínuo, o que sugere que deve haver um ponto de inflexão ou de mínimo em cada curva do sistema finito que corresponde ao ponto crítico no limite. Estabelece-se então um critério de correspondência: considera-se uma boa estimativa da posição do ponto crítico em cada rede finita a posição deste ponto de inflexão ou mínimo. Conforme se aumenta o tamanho da rede, estes pontos formam uma seqüência que converge para o ponto crítico real no limite do contínuo, em que $\beta = \beta_c$.

Assim, para se avaliar o valor do ponto crítico na rede, pode-se procurar pelo ponto de inflexão na curva da magnetização, por exemplo. No entanto, essa avaliação é muito imprecisa, pois implica no estudo da derivada segunda da magnetização, o que acarretaria erros bastante grandes. A opção mais viável é a localização do mínimo da massa renormalizada, α_R , já que no limite do contínuo $\lim_{\beta \rightarrow \beta_c} \alpha_R = 0$. O valor de β associado à criticalidade através desse critério será denominado β_{min} . Obviamente, espera-se que $\lim_{N \rightarrow \infty} \beta_{min} = \beta_c$. Para o cálculo da massa, mede-se numericamente a função de dois pontos obtida através das transformadas de Fourier do campo e estima-se α_R por um ajuste do propagador, como se explica no capítulo (5).

Em simulações usando as definições descritas até então, resulta nula a média da magnetização de cada componente do campo, isto é, a média da transformada de Fourier a momento zero de cada componente, $\langle M_i \rangle = \langle \tilde{\varphi}_i(k=0) \rangle = 0$. Por outro lado, a média do módulo da magnetização é diferente de zero, $\langle M \rangle = \langle \sqrt{\sum_i M_i M_i} \rangle \neq 0$, enquanto a direção de \vec{M} oscila na variedade S^{N-1} . Em contrapartida, observa-se que essa variação da direção de \vec{M} tende a diminuir conforme $N \rightarrow \infty$. Por conseguinte, é lícito efetuar-se uma rotação do campo idêntica em todos os sítios, ou seja, uma trans-

*Este argumento simples foi obtido em [5].

formação de simetria $SO(\mathcal{N})$ a cada nova configuração do sistema, de modo que \vec{M} aponte numa direção fixa (escolhe-se convencionalmente a direção da \mathcal{N} -ésima componente do campo). Essa transformação não altera a ação nem a medida do modelo, posto que ele é $SO(\mathcal{N})$ -invariante. O resultado dessa operação de rotação é a eliminação do modo zero de todas as componentes do campo exceto da \mathcal{N} -ésima, obtendo-se, para o modelo $SO(2)$, $\langle \vec{M} \rangle = (0, \langle M \rangle)$. Chama-se a esse procedimento “back rotation” [6].

2.3 O Modelo Sigma Não-Linear

O modelo Sigma não-linear, usado como laboratório neste trabalho, pode ser obtido como um limite dos modelos polinomiais $\lambda\varphi^4$ quando $\lambda \rightarrow \infty$ sobre a curva crítica ou, genericamente, sobre curvas com inclinação negativa ($\alpha \leq 0$) no espaço de parâmetros, partindo-se do ponto Gaussiano [7], como mostra a figura (2.2). Esse limite estabelece a conexão entre os modelos sigma não lineares $SO(\mathcal{N})$ e os correspondentes modelos polinomiais $SO(\mathcal{N})$.

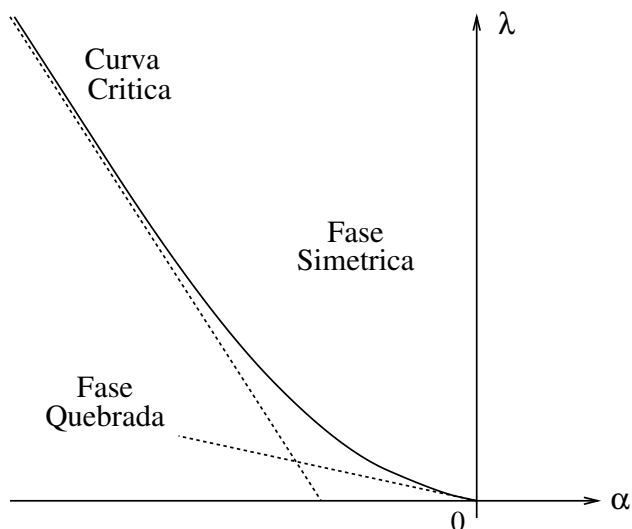


Figura 2.2: Representação da linha crítica no espaço de parâmetros do modelo $\lambda\varphi^4$.

Para construir-se essa conexão, será usada a versão da ação com os parâmetros adimensionais e sem a fonte externa. Divide-se a ação do modelo em duas partes, $S = S_0 + \sum_s V$, sendo

$$\text{parte cinética: } S_0[\varphi] = \sum_s \left(\frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^d \Delta_{\mu} \vec{\varphi} \cdot \Delta_{\mu} \vec{\varphi} \right),$$

$$\text{parte local: } V(\varphi) = \frac{\alpha}{2} (\vec{\varphi} \cdot \vec{\varphi}) + \frac{\lambda}{4} (\vec{\varphi} \cdot \vec{\varphi})^2.$$

A distribuição do modelo é então escrita como

$$[d\varphi] e^{-S_N[\varphi]} = [d\varphi] e^{-\sum_s V(\varphi)} e^{-S_0[\varphi]}. \quad (2.6)$$

Considere-se a parte local normalizada da distribuição,

$$\varrho(\alpha, \lambda, \varphi) = \frac{e^{-V(\varphi)}}{\int_0^\infty d\varphi e^{-V(\varphi)}}, \quad (2.7)$$

e examine-se o seu comportamento quando $\lambda \rightarrow \infty$ e $\alpha = -\beta\lambda$, para algum β positivo. Do cálculo da integral do denominador obtém-se [8], em termos das funções parabólicas cilíndricas \mathbf{D}_ν ,

$$\int_0^\infty d\varphi e^{-V(\varphi)} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left(\frac{\lambda}{2}\right)^{-\frac{1}{4}} \exp\left(\frac{\alpha^2}{8\lambda}\right) \mathbf{D}_{-1/2}\left(\frac{\alpha}{\sqrt{2\lambda}}\right). \quad (2.8)$$

Usando-se a forma assintótica para $\mathbf{D}_{-1/2}$ [9], reescreve-se a distribuição ϱ , para valores grandes de λ , como

$$\varrho(-\beta\lambda, \lambda, \varphi) \approx \sqrt{\frac{\beta\lambda}{\pi}} \exp\left[-\frac{\lambda}{4}(\varphi^2 - \beta)^2\right].$$

Vê-se que, quando $\lambda \rightarrow \infty$, ϱ tende a zero para todo φ , exceto em $\varphi = +\sqrt{\beta}$,[†] ponto em que ela diverge com $\sqrt{\lambda}$. Assim, para uma dada função $f(\varphi)$ contínua e limitada e usando a normalização de ϱ ,

$$\int_0^\infty d\varphi \varrho(-\beta\lambda, \lambda, \varphi) = 1,$$

verifica-se que, no limite $\lambda \rightarrow \infty$,

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty d\varphi f(\varphi) \varrho(-\beta\lambda, \lambda, \varphi) \\ &= f\left(\sqrt{\beta}\right) \int_0^\infty d\varphi \varrho(-\beta\lambda, \lambda, \varphi) = f\left(\sqrt{\beta}\right). \end{aligned}$$

Ou seja, a distribuição tende a uma função delta,

$$\begin{aligned} \lim_{\lambda \rightarrow \infty} \varrho(-\beta\lambda, \lambda, \varphi) &= \delta\left(\varphi - \sqrt{\beta}\right) \\ &= 2\sqrt{\beta} \delta\left(\varphi^2 - \beta\right). \end{aligned}$$

Portanto, nesse limite o valor esperado de um observável se torna

$$\langle \mathcal{O} \rangle_N = \frac{\int [d\varphi \delta(\vec{\varphi} \cdot \vec{\varphi} - \beta)] \mathcal{O}[\varphi] e^{-S_0[\varphi]}}{\int [d\varphi \delta(\vec{\varphi} \cdot \vec{\varphi} - \beta)] e^{-S_0[\varphi]}},$$

[†]Há dois picos no caso $\mathcal{N} = 1$, em $\varphi = \pm\sqrt{\beta}$.

com a medida

$$[d\varphi \delta(\vec{\varphi} \cdot \vec{\varphi} - \beta)] = \prod_{i,s} d\varphi_i(x) \delta[\vec{\varphi}(x) \cdot \vec{\varphi}(x) - \beta],$$

em que a função delta implica na condição de vínculo $\vec{\varphi} \cdot \vec{\varphi} = \beta$ e β faz o papel de uma constante inversa de acoplamento.

Com base nesse resultado, define-se a ação no caso clássico discreto por

$$S_N[\varphi] = \frac{1}{2} \sum_s \left(\sum_{\nu=1}^d \Delta_\nu \vec{\varphi} \cdot \Delta_\nu \vec{\varphi} \right), \quad (2.9)$$

também sujeita à condição de vínculo. Reescalando-se os campos da mesma forma que em (2.2) e usando as transformações (2.3) ao se tomar $a \rightarrow 0$, obtém-se novamente a ação contínua clássica:

$$S_N[\varphi] = \frac{1}{2} \sum_x a^d \left(\sum_{\nu=1}^d \frac{\Delta_\nu \vec{\varphi}}{a} \frac{\vec{\varphi}}{a^{\frac{d-2}{2}}} \cdot \frac{\Delta_\nu \vec{\varphi}}{a} \frac{\vec{\varphi}}{a^{\frac{d-2}{2}}} \right) \rightarrow S_0[\phi] = \frac{1}{2} \int d^d x \left(\sum_{\nu=1}^d \partial_\nu \vec{\phi} \cdot \partial_\nu \vec{\phi} \right), \quad (2.10)$$

sujeita à condição de vínculo

$$\vec{\phi} \cdot \vec{\phi} = \beta a^{2-d} = \mu_b^2, \quad (2.11)$$

que define os usuais modelos Sigma com grupo de simetria $SO(\mathcal{N})$.

Os campos ficam, portanto, confinados a uma esfera $S^{\mathcal{N}-1}$, definida no espaço euclidiano com \mathcal{N} dimensões pela equação de vínculo $\vec{\varphi} \cdot \vec{\varphi} = \beta$. O caso $\mathcal{N} = 1$ define o modelo de Ising, cujo espaço interno fica limitado a dois pontos (\mathbb{Z}^2), e que apresenta o mesmo comportamento crítico, exceto para $d = 2$.

Capítulo 3

Topologia das Configurações

As soluções das equações de movimento para o modelo clássico, definido pela ação (2.10), com condições de contorno periódicas e vínculo $\vec{\phi} \cdot \vec{\phi} = \mu_b^2$, correspondem a configurações do campo que podem ser separadas segundo classes topológicas distintas. Na seção (3.1) serão obtidas essas soluções e estabelecidas as classes de homotopia das configurações. Na seção (3.2) serão definidos os observáveis da teoria quântica para a medida das classes topológicas das configurações no modelo discreto que sejam condizentes com o caso contínuo clássico.

3.1 Topologia no Modelo Clássico

Procuram-se as configurações dos campos em que a ação (2.10) seja mínima. Para que se encontrem tais configurações, resolve-se a equação de movimento e mostra-se que as soluções obtidas implicam em mínimos de S .

A partir de agora, o tratamento restringe-se apenas ao caso $\mathcal{N} = 2$ e serão impostas condições periódicas de contorno no espaço-tempo, isto é, $\phi_i(x_\mu + L\mathbf{e}_\mu) = \phi_i(x_\mu)$, em que \mathbf{e}_μ é um versor na direção μ . Por conveniência dos cálculos, reescreve-se a ação (2.10) em função de campos reescalados adimensionais $\psi_i = \phi_i/\mu_b$

$$S[\psi] = \oint d^d x \mathcal{L} = \frac{\mu_b^2}{2} \oint d^d x \sum_{\mu=1}^d (\partial_\mu \vec{\psi} \cdot \partial_\mu \vec{\psi}). \quad (3.1)$$

A integral fechada indica condições de contorno periódicas e \mathcal{L} é a densidade lagrangiana do modelo. O vínculo, neste caso, restringe o campo a valores sobre a circunferência unitária. Trata-se, portanto, de um campo escalar no espaço-tempo, com módulo fixo no espaço interno restrito pelo vínculo $\vec{\psi} \cdot \vec{\psi} = 1$ e cujas configurações limitam-se ao conjunto de possíveis direções sobre uma circunferência (S^1) de raio 1.

Antes de se imporem as equações de movimento, é mais fácil resolver-se a equação de vínculo. Usa-se a parametrização $\psi_1 = \sin\Theta$ e $\psi_2 = \cos\Theta$, em que o campo Θ faz o papel de um ângulo dependente de x , de modo que a ação é reescrita como

$$S[\Theta] = \frac{\mu_b^2}{2} \oint d^d x \sum_{\mu=1}^d (\partial_\mu \Theta)^2. \quad (3.2)$$

Assim, a equação de movimento é imposta sobre as variáveis angulares Θ ,

$$\partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \Theta)} = \mu_b^2 \sum_{\mu=1}^d \partial_\mu^2 \Theta = 0, \quad (3.3)$$

sujeitas ainda às condições de contorno $\Theta(x_\mu) = \Theta(x_\mu + L\mathbf{e}_\mu) + 2m\pi$, $m \in \mathbb{Z}$. Obtém-se como soluções

$$\Theta_n(x) = \frac{2\pi}{L} \sum_{\mu=1}^d x_\mu n_\mu, \quad (3.4)$$

em que $n_\mu = (n_1, \dots, n_d)$ representa um conjunto de parâmetros inteiros, dadas as condições periódicas de contorno. As soluções encontradas correspondem a valores estacionários da ação, isto é, fazem $\delta S = 0$. Tomando pequenas variações arbitrárias do campo em torno das soluções Θ_n , obtém-se a variação correspondente para a ação,

$$\delta S = \frac{\mu_b^2}{2} \oint d^d x \sum_{\mu=1}^d (\partial_\mu \delta \Theta)^2,$$

que é sempre positiva, o que garante que as soluções encontradas sejam mínimos locais. Assim, os valores da ação nos pontos de mínimo são

$$S^{(0)}[\Theta_n] = \frac{2\pi^2 \mu_b^2}{L^{2-d}} \sum_{\mu=1}^d n_\mu^2 \quad (3.5)$$

e o mínimo global é dado por $n_\mu = 0$, que corresponde a $\Theta_n = 0$, ou seja, todos os vetores ψ estão alinhados na direção $i = 2$, o que está de acordo com as convenções adotadas nos programas.

As transformações que levam os campos de uma configuração estacionária a outra são descontínuas, caracterizando a existência de configurações topologicamente distintas, classificadas pelos números n_μ . Os mínimos da ação são finitos mas separados por barreiras infinitamente altas, pois as transformações descontínuas implicam em divergências introduzidas pelas derivadas da ação. Geometricamente, o campo forma configurações que são vistas como enrolamentos sobre um toro, como é ilustrado na figura (3.1).

Dada a motivação geométrica, procuram-se as classes topológicas distintas, denominadas classes de homotopia, que mapeiam a circunferência ordinária S^1 nas configurações do campo S^1 . A solução é óbvia e expressa o número de vezes que o campo é enrolado numa circunferência enquanto o parâmetro $\xi_\mu = 2\pi x_\mu/L$, $0 \leq x_\mu \leq L$, dá uma volta numa circunferência. O número de voltas é o inteiro

$$n_\mu = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\xi_\mu \frac{d\Theta(\xi_\mu)}{d\xi_\mu} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d_\mu \Theta, \quad (3.6)$$

denominado “winding number”[†], que pode ser traduzido como “número de enrolamento” (não há soma sobre índices repetidos). Mais uma vez, sendo as condições de

[†]Ver, por exemplo, [10, 11, 12].

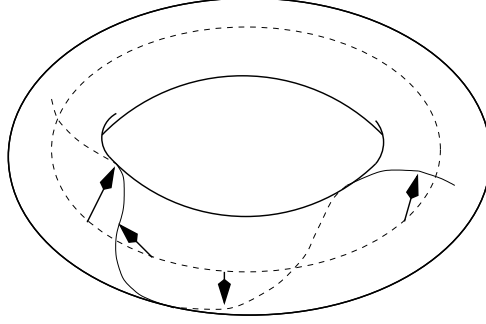


Figura 3.1: Noção geométrica do winding number para o campo em $d = 1$. Visualiza-se o enrolamento sobre um toro. As setas representam os campos $\vec{\psi}$.

contorno periódicas, os limites 0 e 2π se identificam, sem que, no entanto, n_μ seja necessariamente nulo, pois é possível que $\Theta(2\pi) = 2m\pi$, $m \in \mathbb{Z}$.

A definição de uma classe de homotopia para n_μ em $d \geq 2$ exige que ele tenha o mesmo valor em todas as curvas que dão uma volta no toro na direção μ . Para se mostrar essa propriedade, basta examinar o caso bidimensional. Considere-se o valor de n_x numa linha com coordenada fixa $y = y_0$. Faça-se um pequeno deslocamento na direção y e tome-se o valor de n_x nessa nova linha. A variação de n é

$$\begin{aligned} \delta_y n_x &= n_x(y_0 + \delta y) - n_x(y_0) \\ &= \frac{1}{2\pi} \oint d_x \Theta(x, y_0 + \delta y) - \frac{1}{2\pi} \oint d_x \Theta(x, y_0) \\ &= \frac{1}{2\pi} \oint d_x (\delta_y \Theta). \end{aligned}$$

Consegue-se $\delta_y \Theta < \delta$, para um $\delta > 0$ qualquer, tomando-se um acréscimo δy suficientemente pequeno, pois Θ é uma função contínua de x e y . Como a variação de Θ é feita na direção y e seu valor máximo é δ , a integração deve retornar um valor $\epsilon \leq L\delta$. Assim $\delta_y n_x = \epsilon$ pode ser feita também arbitrariamente pequena. Mas, por hipótese, o valor de n_x é obrigatoriamente um inteiro, implicando em $\delta_y n_x \in \mathbb{Z}$. Logo, a única alternativa é $\delta_y n_x = 0 \Rightarrow n_x(y_0 + \delta y) = n_x(y_0)$. Como y_0 é uma posição qualquer, aplicando-se o raciocínio para vizinhanças sucessivas de y , fica demonstrada a assertiva. A extensão para $d \geq 2$ é imediata, bastando-se repetir a prova acima, mas fazendo-se a variação também nas demais direções.

3.2 Caso Quântico

Obviamente, há dificuldades para se colocar a noção de topologia no caso discreto, já que não existe continuidade. Assim, para se medirem os winding numbers numa rede, deve-se encontrar uma definição de observável que retorne o correspondente winding number no limite do contínuo clássico. Inicia-se a construção dos observáveis partindo-se do winding number dado em (3.6)

$$t_\mu = \mathcal{O}_\mu[\Theta] = \frac{1}{2\pi} \oint d_\mu \Theta. \quad (3.7)$$

Aqui, claramente, $t_\mu = n_\mu$ para configurações contínuas. Faz-se a reprodução deste observável no caso discreto, que pode ser compreendida como sua versão regularizada na rede, definindo

$$\tau_\mu^{(1)} = \frac{1}{2\pi} \sum_{\ell(\mu)}^N \Delta_\ell^{(m)} \Theta, \quad (3.8)$$

em que a soma é efetuada sobre os links consecutivos $\ell(\mu)$ na direção μ . Há duas escolhas para a diferença entre os ângulos de dois vetores subseqüentes; é razoável escolher-se a menor diferença, pois no limite do contínuo espera-se que $\Delta\Theta \rightarrow d\Theta$, que é supostamente pequeno. Assim $\Delta_\mu^{(m)}\Theta$ representa a diferença minimal à frente, definida no intervalo $-\pi \leq \Delta_\mu^{(m)}\Theta \leq +\pi$, determinando-se as direções positiva e negativa de enrolamento de acordo com a regra da mão direita. Interpretam-se as diferenças angulares entre os sítios vizinhos como interpolações locais dos campos, a serem identificadas com as configurações contínuas [1] no caso de redes grandes.

Como outra forma de se evitar qualquer ambigüidade quanto à escolha da diferença $\Delta_\mu\Theta$, define-se o observável

$$\tau_\mu^{(2)} = \frac{1}{2\pi} \sum_{\ell(\mu)}^N \text{sen}(\Delta_\ell\Theta), \quad (3.9)$$

pois a função periódica retorna o mesmo valor tanto para um determinado argumento quanto para o suplementar deste com orientação contrária, permitindo o uso da diferença à frente usual. No limite do contínuo, sendo $|\Delta_\mu\Theta|$ pequeno, espera-se que

$$\text{sen}(\Delta_\ell\Theta) \approx \Delta_\ell^{(m)}\Theta = \Delta_\ell\Theta,$$

mostrando que $\tau_\mu^{(1,2)} \rightarrow t_\mu$. Em redes finitas, $|\Delta_\mu\Theta|$ é no máximo igual a π para cada link, limitando os valores dos observáveis ao intervalo $[-N/2, N/2]$. Observe-se que, enquanto $\tau^{(1)}$ assume apenas valores inteiros, o mesmo só é verdade para $\tau^{(2)}$ no limite do contínuo.

Para a implementação desses observáveis no programa, as grandezas utilizadas são os valores dos campos adimensionais ψ em cada sítio, e não de Θ . Os campos ψ são convenientes, por exemplo, para o procedimento de Monte Carlo, como mostrado nas seções (4.2) e (4.3). Assim, obtém-se o valor de $\Delta\Theta$ para campos de sítios vizinhos, $\vec{\psi}_+$ e $\vec{\psi}_-$, a partir do produto escalar dos campos,

$$|\Delta\Theta| = \arccos(\vec{\psi}_+ \cdot \vec{\psi}_-),$$

que retorna um valor no intervalo $0 \leq \Delta\Theta \leq \pi$, ao passo que o sentido de enrolamento, pois trata-se de um ângulo orientado, é dado pelo sinal s_Θ do produto “cruzado” em duas dimensões,

$$\begin{aligned} s_{\Theta} &= \text{sign}(\vec{\psi}_- \times \vec{\psi}_+), \\ \vec{\psi}_- \times \vec{\psi}_+ &= \psi_{1-}\psi_{2+} - \psi_{2-}\psi_{1+}. \end{aligned}$$

Como visto anteriormente, em $d \geq 2$, o winding number só tem significado se seu valor for o mesmo em todas as linhas paralelas a uma dada direção. Por analogia com esse critério, presume-se que a média de $\tau_{\mu}^{(1,2)}$ sobre todas as linhas de uma direção indique qual o winding number da configuração. Os observáveis passam a ser, portanto,

$$\bar{\tau}_{\mu}^{(1,2)} = \frac{1}{N^{d-1}} \sum_{s(\perp\mu)}^{N^{d-1}} \tau_{\mu}^{(1,2)}, \quad (3.10)$$

em que $\sum_{s(\perp\mu)}^{N^{d-1}}$ indica a soma na seção perpendicular à direção μ , ou seja, trata-se da média sobre todas as linhas paralelas a essa direção.

Imagine-se agora o caso em que as várias linhas sobre as quais efetuamos a média (3.10) tenham valores ligeiramente distintos. Fica a questão: está caracterizada a classe de homotopia? Em verdade estamos interessados principalmente na possibilidade de formação de alguma topologia, independentemente do winding number que a caracterize e, nesse caso, se há distinção do caso trivial, $\bar{\tau}_{\mu}^{(1,2)} = 0 \mathbf{e}_{\mu}$. Propõe-se, então, a medida da dispersão dos valores do winding number em cada configuração, usando o observável

$$\omega_{\mu}^{(1,2)} = \sqrt{\frac{1}{N^{d-1}} \sum_{s(\perp\mu)}^{N^{d-1}} [\tau_{\mu}^{(1,2)} - \bar{\tau}_{\mu}^{(1,2)}]^2}. \quad (3.11)$$

Dada a simetria da rede nas várias direções, definimos ainda:

$$\omega^{(1,2)} = \frac{1}{d} \sum_{\mu=1}^d \omega_{\mu}^{(1,2)}, \quad (3.12)$$

que mostra se é definido ou não o caráter da topologia global do sistema. Finalmente, como $\omega^{(1,2)} = 0$ define a existência de classes homotópicas, queremos saber se em média essas classes são fisicamente relevantes, o que nos leva a considerar $\langle \omega^{(1,2)} \rangle$ como os observáveis a serem implementados. Chamaremos genericamente esses observáveis de dispersões topológicas. Se

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \langle \omega^{(1,2)} \rangle = 0$$

em torno do ponto crítico, então estará bem definido, em média, o caráter topológico das configurações do campo. Nesse caso, os observáveis (3.10) determinam o winding number. Como uma avaliação dos valores possíveis de $\tau_{\mu}^{(1,2)}$, foram coletadas todas as medidas efetuadas desses observáveis, independentemente da direção ou posição das linhas, e montados histogramas em função de β .[‡] No apêndice (B) são mostradas outras justificativas para os observáveis $\omega^{(1,2)}$ e $\tau^{(1,2)}$.

[‡]Usamos, para melhor visualização, um parâmetro associado a β . Ver capítulo (4.3).

Capítulo 4

Simulações Estocásticas

A descrição das teorias de campo na rede oferece um processo alternativo para a computação das grandezas fisicamente relevantes, isto é, dos valores esperados dos observáveis. Trata-se da simulação estocástica dos sistemas formulados no ambiente discreto, em conexão com os métodos usados em mecânica estatística. A interpretação dos resultados, no entanto, é feita pelo ponto de vista das teorias de campos: aqui, toma-se o limite em que o espaçamento da rede vai a zero, enquanto lá mantém-se o espaçamento fixo enquanto $N \rightarrow \infty$, o que corresponde ao limite termodinâmico.

Descrevem-se neste capítulo os métodos usados para a simulações de modelos em redes euclidianas. Primeiramente, é feita uma pequena introdução dos princípios do Método de Monte Carlo, direcionada para as simulações de modelos em equilíbrio termodinâmico. Na seção (4.2) é apresentado o método utilizado nas simulações deste trabalho, conhecido por método de “clusters” de Wolff. A seguir são apresentados importantes tópicos relacionados às simulações e então é feito um resumo do programa usado.

4.1 Algoritmos de Monte Carlo

O nome Monte Carlo abrange uma gama bastante variada de métodos envolvendo sorteio, que se distinguem em dois tipos básicos, a saber, os destinados à solução de problemas probabilísticos e os que são desenvolvidos para a estimativa de resultados em problemas determinísticos. No caso de problemas determinísticos, simulações relacionadas aos problemas fornecem a solução numérica quando as ferramentas algébricas se mostram insuficientes. No caso probabilístico, usam-se critérios de escolha de números, gerados aleatoriamente, simulando diretamente os processos físicos em foco. Obviamente, opta-se pela simulação quando os métodos analíticos não bastam para a avaliação de uma certa propriedade ou de um resultado. Esses métodos têm sido cada vez mais usados graças ao aumento do desempenho dos computadores e da sofisticação das rotinas para a geração de números pseudo-aleatórios.

Para sistemas ainda pequenos, como redes com $N = 10$ em duas dimensões, torna-se impossível, do ponto de vista computacional, realizar-se a soma sobre todas as configurações. Uma rápida estimativa num caso simples, como o modelo de Ising, evidencia

o problema. O número de configurações nesse caso é $2^{100} \approx 10^{30}$; portanto, se um computador conseguisse registrar os cálculos referentes a um bilhão de configurações por segundo, algo ainda surpreendente hoje em dia, seria necessário um tempo superior a duas mil idades estimadas do universo para se realizar a operação completa.

Como alternativa, efetua-se a computação sobre uma fração pequena do total de configurações, mas ainda assim um número suficiente delas para que se obtenham resultados estatísticos de boa qualidade. Por essa via, boa parte das configurações que têm pouca relevância estatística nas somas são desconsideradas.

Os métodos de Monte Carlo propiciam a construção de algoritmos que geram seqüências de configurações, C_1, C_2, \dots , sobre as quais são efetuadas as medidas dos observáveis. Se o equilíbrio estatístico é alcançado, a probabilidade de se encontrar uma determinada configuração C' na seqüência é proporcional a $e^{-S_{C'}}$. Nessas condições, o valor esperado de um observável \mathcal{O} pode ser aproximado por

$$\langle \mathcal{O} \rangle_N \approx \frac{1}{p} \sum_{i=q+1}^{p+q} \mathcal{O}(C_i),$$

em que $p+q$ configurações foram geradas, havendo sido desprezadas as q primeiras, que levaram ao equilíbrio estatístico.

O algoritmo a ser utilizado deve gerar cada nova configuração a partir da anterior, criando uma seqüência que permaneça em equilíbrio. Trata-se, portanto, de uma seqüência de Markov, em que cada configuração C' fica totalmente determinada pela anterior, C , e pela probabilidade de transição entre elas, expressa pelo elemento de matriz $\mathcal{W}_{C \rightarrow C'}$. Sendo \mathcal{W} uma probabilidade, deve obedecer à

$$\begin{aligned} \text{normalização:} & \quad \sum_{C'} \mathcal{W}_{C \rightarrow C'} = 1 \quad \text{e à} \\ \text{positividade:} & \quad \mathcal{W}_{C \rightarrow C'} \geq 0. \end{aligned}$$

Além disso, qualquer estado C' deve ser acessível num número finito de transições, partindo-se de qualquer outro estado C , ao que se chama condição de

$$\text{ergodicidade:} \quad \mathcal{W}_{C \rightarrow C'}^n = \sum_{C_1} \sum_{C_2} \dots \sum_{C_n} \mathcal{W}_{C \rightarrow C_1} \mathcal{W}_{C_1 \rightarrow C_2} \dots \mathcal{W}_{C_n \rightarrow C'} > 0,$$

para um dado n finito. Se o sistema se encontra em equilíbrio, então a transição de C para C' deve manter o sistema em equilíbrio exigindo-se que a matriz $\mathcal{W}_{C \rightarrow C'}$ tenha a distribuição de Boltzmann como autovetor

$$\sum_C \mathcal{W}_{C \rightarrow C'} e^{-\beta S_C} = e^{-\beta S_{C'}}.$$

Essa é a denominada condição de “balanço”. Usando a condição de normalização acima (trocando nela C' por C), a equação de balanço pode ser reescrita como

$$\sum_C [\mathcal{W}_{C \rightarrow C'} e^{-\beta S_C} - \mathcal{W}_{C' \rightarrow C} e^{-\beta S_{C'}}] = 0.$$

Esta equação pode ser resolvida pela escolha

$$\mathcal{W}_{C \rightarrow C'} e^{-\beta S_C} = \mathcal{W}_{C' \rightarrow C} e^{-\beta S_{C'}} , \quad (4.1)$$

que define o chamado “balanço detalhado” ou “reversibilidade microscópica”. Esta forma é mais simples do que a anterior pois não envolve soma sobre todas as configurações.

Descrevemos agora o algoritmo de Metropolis[†], que foi o primeiro utilizado em simulações em sistemas de rede e serve como uma introdução ao algoritmo mais complexo de Wolff, apresentado na próxima seção.

A idéia é gerar novas configurações do campo através do balanço detalhado, levando às condições de equilíbrio termodinâmico. Dessa forma, “caminha-se” pelo espaço de configurações, medindo-se os observáveis relevantes a cada novo passo e tirando-se amostras periodicamente.

A seqüência para um passo no espaço de configurações é a seguinte:

1. Altera-se uma configuração C para C' sorteando-se um sítio aleatoriamente e mudando-se o valor do campo neste sítio. No modelo de Ising, por exemplo, inverte-se o valor do campo $\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$; para um modelo com grupo de simetria superior a $O(1)$, um possível procedimento é descrito na próxima seção;
2. Calcula-se a variação do valor da ação com a mudança efetuada: $\Delta S = S(C') - S(C)$;
3. Define-se a matriz estocástica:

$$\mathcal{W}_{C \rightarrow C'} = \begin{cases} 1 & \text{se } S_C > S_{C'} \\ e^{-\beta \Delta S} & \text{se } S_C < S_{C'} \end{cases} , \quad (4.2)$$

que dá a probabilidade de transição $C \rightarrow C'$, com $\beta = 1/k_B T$. A nova configuração é aceita segundo essa probabilidade.

Considerando, por exemplo, o caso $S_C < S_{C'}$, essa condição pode ser escrita como

$$\frac{\mathcal{W}_{C \rightarrow C'}}{\mathcal{W}_{C' \rightarrow C}} = e^{-\beta \Delta S} = \frac{e^{-\beta S_{C'}}}{e^{-\beta S_C}} , \quad (4.3)$$

que corresponde à condição de balanço detalhado (4.1).

O processo descrito é repetido e as medidas pertinentes são realizadas a cada nova configuração, obtendo-se um conjunto de dados cujas médias constituem as grandezas relevantes.

[†]Ver, por exemplo, [11, 13].

4.2 Método de “Clusters” de Wolff

A probabilidade de se encontrar o sistema numa certa configuração num determinado passo da evolução do algoritmo é fortemente dependente do estado do sistema no passo anterior. Usando-se o método de Metropolis para a simulação do modelo de Ising, por exemplo, apenas N^d estados podem ser alcançados a cada passo, caracterizando-se a localidade desse algoritmo, isto é, caminha-se muito lentamente no espaço de configurações, de modo que as grandezas medidas ficam muito correlacionadas, aumentando os erros nas medidas dos observáveis.

Uma maneira de se contornar esse problema é aguardar-se um certo número de passos até que o sistema perca a “memória” do passo anterior. Para se calcular quão distantes na seqüência devem ser as medidas de uma certa grandeza f para que sejam consideradas independentes, usa-se a função de autocorrelação

$$\kappa(p) = \frac{\langle f_{C_i} f_{C_{i+p}} \rangle - \langle f_{C_i} \rangle \langle f_{C_{i+p}} \rangle}{\langle f_{C_i}^2 \rangle - \langle f_{C_i} \rangle^2}, \quad (4.4)$$

em que C_i representa a i -ésima configuração e as médias são tomadas sobre um intervalo de “ p ” passos do algoritmo. A função κ é normalizada de forma que $\kappa(0) = 1$ quando f é completamente correlacionada e $\kappa(p) = 0$ indica que f é totalmente decorrelacionada após p passos.

Empiricamente se sabe que, próximo à criticalidade, o “tempo de autocorrelação” τ (número de passos) diverge com o comprimento de correlação ξ segundo uma relação da forma $\tau \sim \xi^z$, em que z é chamado “expoente crítico dinâmico”. Em um sistema finito, τ não diverge pois ξ não deve exceder o tamanho da caixa (L), mas aumenta com o comprimento do sistema como $\tau \sim L^z$. Para o algoritmo de Metropolis e para qualquer outro que mude apenas um spin a cada passo, $z \approx 2,1$, de forma que τ cresce rapidamente [15, 16].

Essa relação pode ser entendida fisicamente analisando-se o comportamento do sistema na vizinhança da criticalidade, em que mais spins ficam alinhados. A mudança de um spin implica em grande aumento de energia se ele está alinhado com seus vizinhos, o que torna a troca estatisticamente improvável, dificultando a transição do sistema para outros estados. Logo, o número de passos para que os observáveis tornem-se decorrelacionados é cada vez maior. Esse fenômeno é conhecido por “critical slowing down”. Para se evitar esse problema, é necessário que se caminhe mais rapidamente no espaço de configurações, alterando-se o valor do campo em vários sítios simultaneamente. Isto é conseguido com o algoritmo de “clusters” desenvolvido por Wolff [14, 15].

O algoritmo será descrito para modelos Sigma com simetria $O(\mathcal{N})$. A idéia central consiste de se juntar um aglomerado (cluster) de sítios e de se fazer uma reflexão simultânea dos campos em todos esses sítios.

Os passos do algoritmo são:

1. Escolhe-se um sítio aleatoriamente, cujo campo é designado como $\vec{\psi}(i)$;
2. Escolhe-se aleatoriamente uma direção no espaço interno, $\hat{r} \equiv$ versor com \mathcal{N} componentes;

3. Visitam-se todos os sítios vizinhos do sítio i , cujos campos são denotados $\vec{\psi}(j)$, e “ativam-se” os links $\ell(i, j)$ com a probabilidade

$$P_{\ell(i,j)} = 1 - \exp \left\{ \min \left[0, -2\beta(\vec{\psi}_i \cdot \hat{r})(\vec{\psi}_j \cdot \hat{r}) \right] \right\} . \quad (4.5)$$

Os sítios vizinhos com links ativados fazem parte do cluster. Repete-se o processo sucessivamente para cada um dos $\vec{\psi}(j)$, ativando-se também seus vizinhos com a probabilidade (4.5). Duas regras devem ser observadas:

- (a) não se modificam links já examinados;
 - (b) não se visitam sítios já verificados.
4. Refletem-se os campos dos sítios pertencentes ao cluster segundo o hiperplano $(\mathcal{N} - 1)$ -dimensional, cuja normal aponta na direção \hat{r} . Essa operação é dada por

$$R(\hat{r})\vec{\psi}(i) = \vec{\psi}(i) - 2[\vec{\psi}(i) \cdot \hat{r}]\hat{r} , \quad (4.6)$$

ou seja, inverte-se a componente do campo paralela a \hat{r} .

Durante a construção do cluster a direção \hat{r} é mantida fixa; os campos são refletidos somente no final da montagem do cluster. No caso do modelo de Ising, que tem simetria $O(1)$, a reflexão reduz-se à multiplicação por -1 .

Este algoritmo mostra-se bastante eficiente, com $z \approx 0,35$. A demonstração de que ele obedece ao balanço detalhado é dada no apêndice (C).

4.3 Descrição do Algoritmo

O sistema utilizado para a simulação do modelo e medida dos observáveis constitui um conjunto de cinco programas escritos em FORTRAN, cada um dos quais realiza uma tarefa distinta no processo de obtenção dos dados.

Para cada simulação é fixada a dimensão espaço-temporal d , o grupo de simetria \mathcal{N} , o número de sítios da rede N^d , e o valor de β , ou melhor, sendo β o único parâmetro da teoria, usamos alternativamente o parâmetro $\theta = \arctan(1/\beta)$ por conveniência.

O primeiro programa é responsável pela verificação e/ou atualização dos parâmetros da teoria, dos parâmetros estatísticos (número de médias a serem geradas, etc.) e pela criação de arquivos de controle da simulação.

O segundo programa, que foi denominado “sampler”, efetua a simulação. Dois passos são necessários nessa fase: primeiramente, o programa gera um pequeno conjunto de dados, a saber, o bastante para que ocorra a relaxação do sistema. Nesse ponto se pode julgar se o campo relaxou suficientemente examinando-se os dados produzidos e coloca-se em funcionamento o terceiro programa, que calcula as funções de autocorrelação.

Dá-se então o segundo passo, voltando ao sampler, que retoma o campo já relaxado e prossegue com a simulação. Esta compreende várias etapas:

1. O sampler verifica os parâmetros iniciais;
2. É criada uma estrutura de indexação que reduz as estruturas matriciais a simples vetores, acelerando o processamento. Uma segunda estrutura indexa as faces do hipercubo d -dimensional para que os winding numbers sejam medidos em cada linha pelos observáveis (3.8) e (3.9);
3. Inicia-se um “loop” para a geração de uma média dos valores medidos. Calculam-se as transformadas de Fourier do campo a serem usadas no cálculo da funções de correlação;
4. Medem-se os winding numbers;
5. Acumulam-se os dados em variáveis temporárias que formarão submédias;
6. Procede-se à renovação da configuração do campo pelo algoritmo de cluster;
7. Executa-se a operação de back-rotation;
8. Termina um loop. São armazenados em arquivos os dados parciais obtidos, dentre eles as submédias e a atual configuração do campo;
9. Repete-se o procedimento até a geração de todas as submédias pedidas no programa primeiro.

Com o fim da simulação, inicia-se a execução do quarto programa, cuja função é tirar as médias finais e efetuar o cálculo das grandezas derivadas dos demais dados (massa, etc.). São também calculados os erros estatísticos e os comprimentos de autocorrelação, com a conseqüente correção das barras de erro pelo comprimento de autocorrelação.

Para a avaliação dos erros estatísticos, acumulamos as medidas dos observáveis a cada passo do algoritmo e, após um certo número r de passos, tiramos a média dessas medidas, formando uma média parcial. Calculamos as dispersões sobre as submédias, considerando ainda as autocorrelações das medidas.

Medimos o comprimento de autocorrelação dos observáveis ajustando às funções de autocorrelação já medidas uma curva do tipo $e^{-\frac{t}{\tau}}$, com $t = 1, \dots, p$. Corrigem-se então as barras de erro por $\sqrt{\tau}$.

O quinto programa separa convenientemente os resultados finais em diversos arquivos, permitindo a posterior junção com os resultados das simulações de outras redes para a confecção de gráficos.

As etapas seguintes são independentes dos programas e consistem da reunião dos resultados obtidos nas simulações de cada rede em cada dimensão e análise do comportamento das grandezas no limite do contínuo.

Capítulo 5

Resultados Numéricos

Depois de realizadas as simulações para vários valores de β , em uma dada rede com N^d sítios, tem-se uma idéia geral do diagrama de fases do modelo para essa rede. No entanto, os resultados relevantes na rede são os que correspondem ao ponto crítico, como explicado anteriormente na seção (2.2). Como também foi mencionado nessa seção, β_{min} é obtido pela localização do mínimo da massa renormalizada α_R . Efetuam-se, então, mais algumas simulações na região em que a massa esboça seu mínimo. Para o cálculo da massa, mede-se numericamente a função de dois pontos obtida através das transformadas de Fourier do campo e estima-se α_R através do ajuste ao propagador de uma expressão semelhante ao propagador da teoria livre $(p^2 + m^2)^{-1}$,

$$\tilde{g}_{(2),i}(k) = \langle \tilde{\psi}_i^*(k) \tilde{\psi}_i(k) \rangle \sim \frac{1}{N^d} \frac{\mathcal{R}}{\rho^2(k) + \alpha_R}. \quad (5.1)$$

As quantidades $\rho^2(k)$ são os autovalores do laplaciano na rede, i indica a i -ésima componente do campo e verifica-se que o resíduo do propagador é consistente com $\mathcal{R} = 1$. Devido ao procedimento de back rotation, que realinha a magnetização na direção da componente 2 do campo, a componente escolhida para o cálculo da massa é ψ_2 , ligada à formação dos bósons de Higgs. O cálculo da massa pela componente ψ_1 , associada aos bósons de Goldstone, fornece $\alpha_R = 0$ na fase quebrada, o que elimina o mínimo da massa, dificultando a avaliação de β_{min} .

Havendo conseguido pontos suficientes para a identificação da região de mínimo, em média 3 a 4 pontos, ajusta-se um polinômio de grau 2 nessa vizinhança, conforme se mostra na figura (5.2) para o caso $N = 6$ em $d = 4$. O valor de β_{min} obtido é usado para a determinação dos valores críticos correspondentes nos demais observáveis pelo ajuste de retas nas vizinhanças desses pontos, como apresentado na figura (5.3).

A seguir são apresentados os resultados principais obtidos nas simulações numéricas, a saber, os observáveis das dispersões $\langle \omega^{(1,2)} \rangle_N$, para $d = 2, 3, 4$. Outros dados relacionados, como as massas e os histogramas, podem ser encontrados no apêndice (A).

Claramente, em todos os casos, as dispersões aumentam seu valor no ponto crítico conforme N cresce, indicando que não há definição de topologia na teoria quântica: qualquer caráter topológico tende a desaparecer quando o limite do contínuo é tomado.

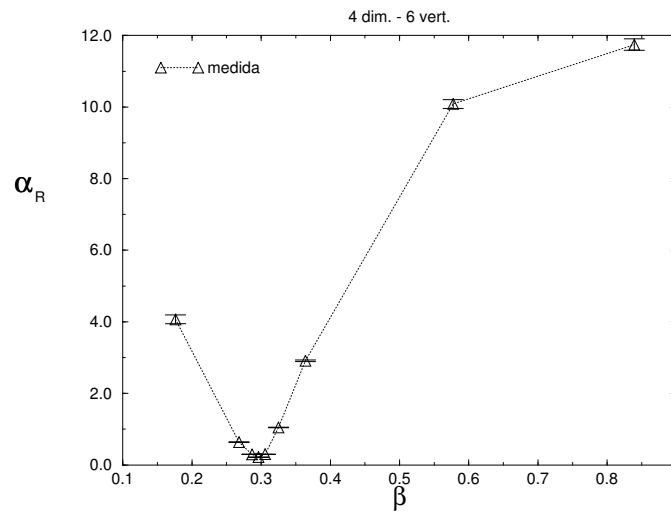


Figura 5.1: Valores medidos da massa renormalizada α_R .

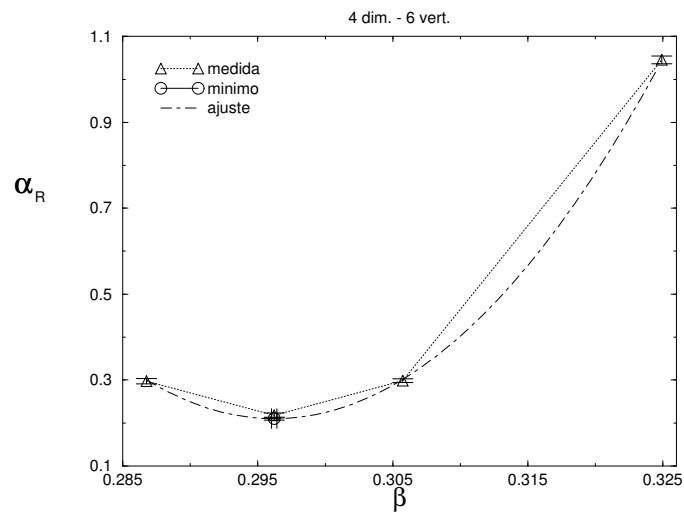


Figura 5.2: Ajuste de um polinômio de grau 2 na região correspondente ao mínimo de α_R .

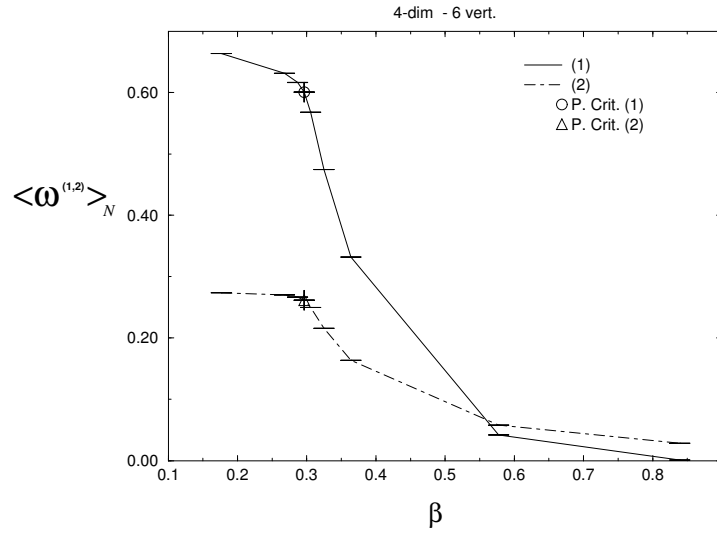


Figura 5.3: Valores críticos para as dispersões $\langle \omega^{(1,2)} \rangle_N$. São indicados os pontos críticos obtidos pela localização do mínimo da massa nas curvas de cada observável.

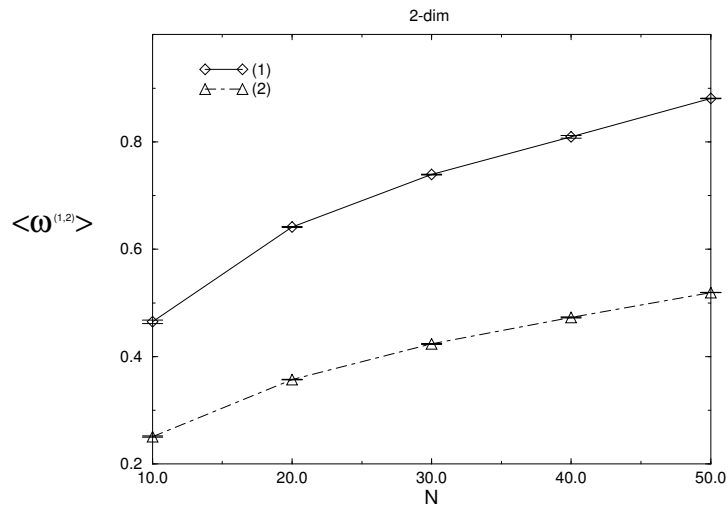


Figura 5.4: Dispersões nos pontos críticos das redes em duas dimensões.

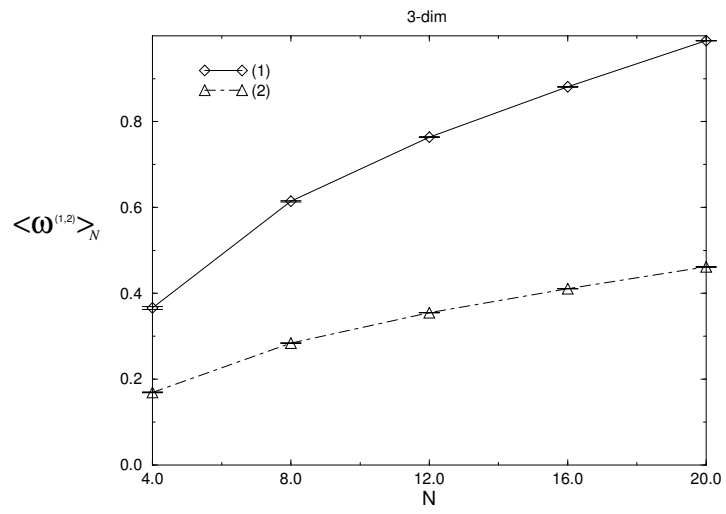


Figura 5.5: Dispersões nos pontos críticos das redes em três dimensões.

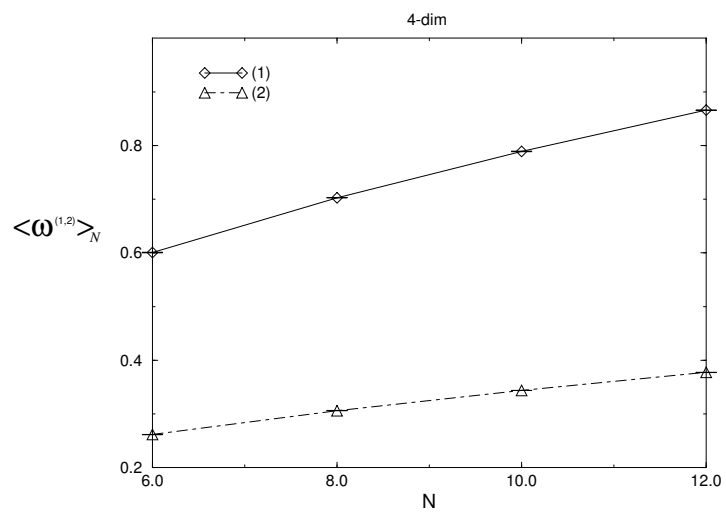


Figura 5.6: Dispersões nos pontos críticos das redes em quatro dimensões.

Capítulo 6

Conclusões e Perspectivas

Todos os resultados obtidos mostram claramente que as dispersões $\langle \omega^{(1,2)} \rangle$ crescem com o aumento da rede, o que significa que não se configura topologia no ponto crítico. Mais precisamente, concluímos que qualquer caráter topológico é perdido em β_{min} e sua vizinhança quando N aumenta. Por extensão, podemos dizer que não há topologia definida em β_c quando tomamos o limite do contínuo, $N \rightarrow \infty$.

Vemos, portanto, que a presença do vínculo $\vec{\psi} \cdot \vec{\psi} = 1$, que permite a organização das configurações em classes de homotopia, não é suficiente para garantir o caráter topológico ao efetuarmos a quantização do modelo. Esse comportamento do campo é nitidamente contrário ao que se poderia esperar da analogia com um sistema quântico não relativístico, em que, havendo caráter topológico definido, poderia ocorrer tunelamento entre configurações de diferentes classes. Menos relevante ainda seria a analogia com um sistema clássico, no qual as configurações topológicas permaneceriam fixas permanentemente.

Mesmo partindo de um modelo laboratório, as medidas efetuadas refletiram um comportamento típico de teorias quânticas de campo: as fortes flutuações do campo na região crítica. Acreditamos, portanto, que outros modelos devam apresentar essa característica, de modo que quaisquer hipóteses que sejam feitas sobre a conservação de cargas topológicas e estabilidade de configurações topologicamente não triviais devem ser vistas com cautela.

Apêndice A

Resultados Gráficos

São apresentados aqui os demais resultados obtidos nas simulações, mais especificamente as massas renormalizadas, os histogramas e as dispersões $\langle \omega^{(1,2)} \rangle$.

A.1 Massas

Os pontos dos gráficos aqui representados correspondem aos pontos mínimos das massas renormalizadas e foram obtidos conforme descrito na seção (4.3). Observamos que o valor desses pontos diminui conforme N cresce, indo a zero no limite do contínuo. No caso $d = 2$ esse comportamento é mais difícil de ser observado pois, como é típico dessa dimensão, as convergências (ou divergências) são logarítmicas e, portanto, muito lentas. O mesmo é observado no caso dos observáveis $\langle \omega^{(1,2)} \rangle$ da figura (5.4).

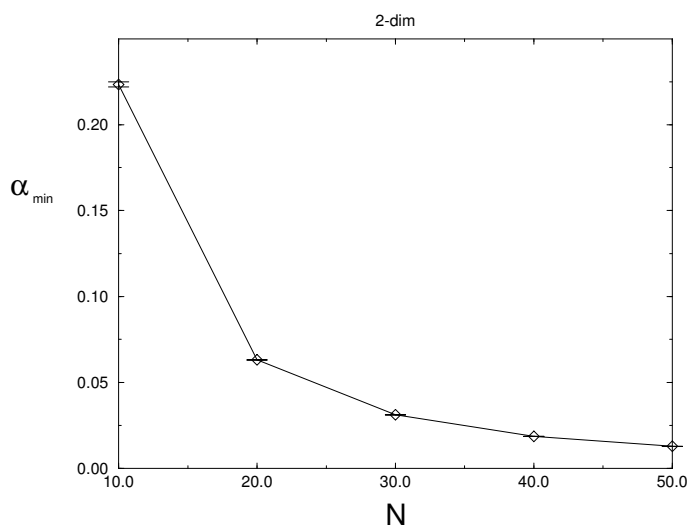


Figura A.1: Mínimos da massa renormalizada em $d = 2$.

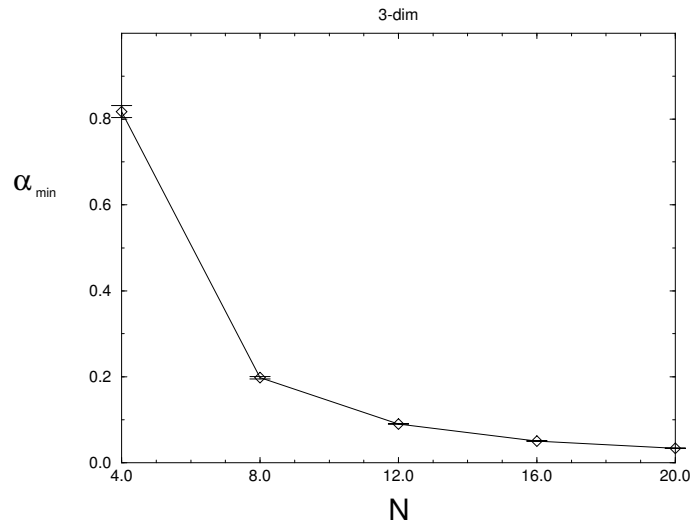


Figura A.2: Mínimos da massa renormalizada em $d = 3$.

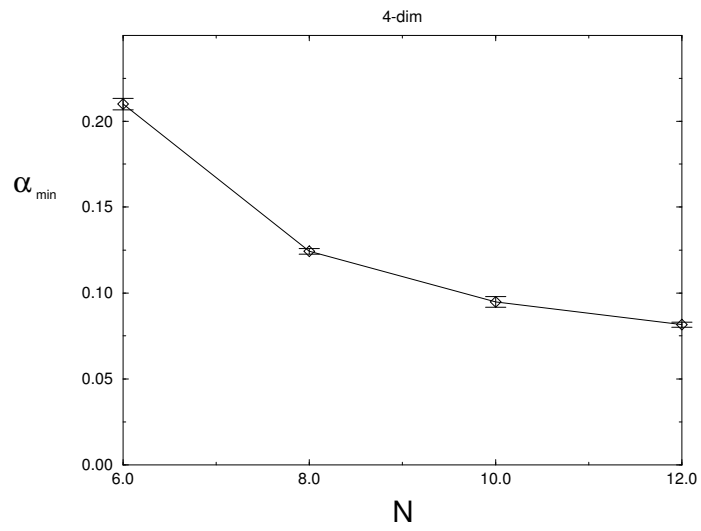


Figura A.3: Mínimos da massa renormalizada em $d = 4$.

A.2 Histogramas

Os histogramas a seguir apresentam todos os valores coletados de $\bar{\tau}_\mu^{(1)}$, independentemente da direção μ do espaço-tempo. Conseguimos assim uma idéia mais clara da flutuação dos valores desse observável para os diversos valores do parâmetro definido na seção (4.3), $\theta = \arctan(1/\beta)$. Os picos vizinhos dos histogramas são unidos por linhas retas, formando uma superfície. Tendo em vista enfatizarmos o aumento da dispersão desses valores com o aumento de θ , o qual é uma função monotônica da temperatura, cada histograma, correspondente a cada valor desse parâmetro, é normalizado pelo valor de sua barra central (a maior), e as curvas de nível são desenhadas em traço mais forte.

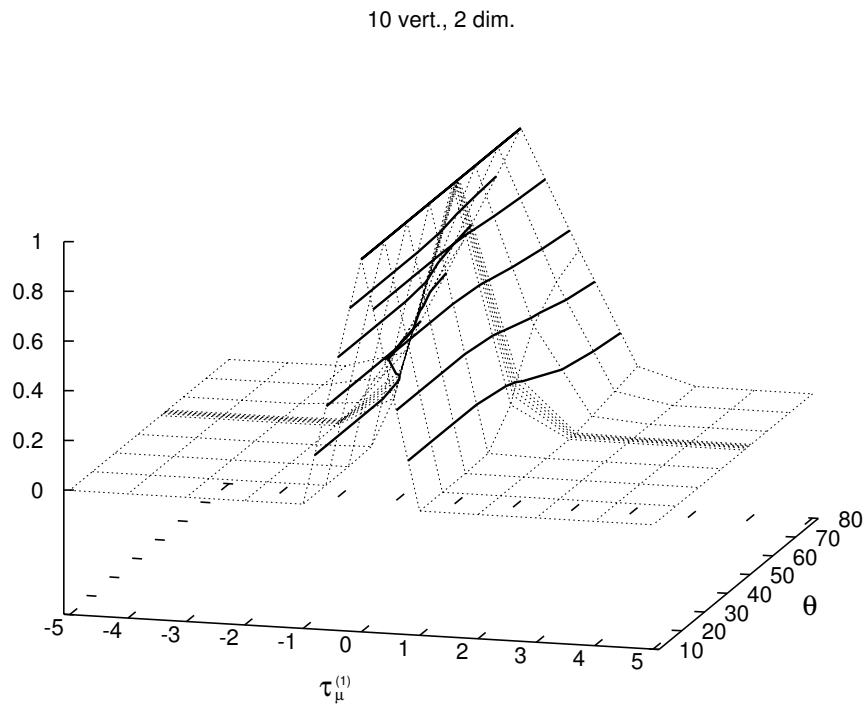


Figura A.4: Histograma para rede em $d = 2$ com $N = 10$.

20 vert., 2 dim.

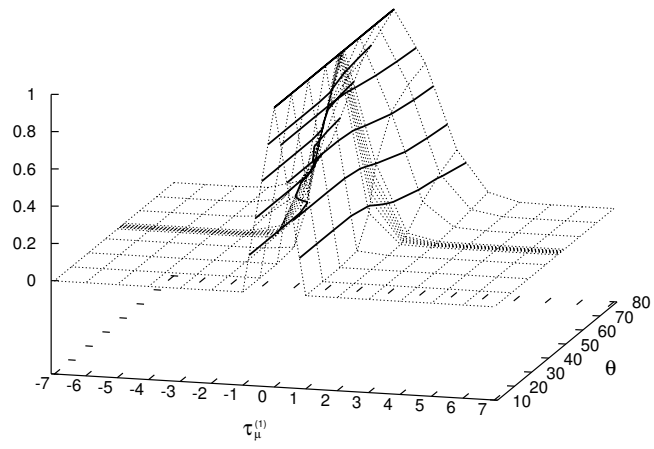


Figura A.5: Histograma para rede em $d = 2$ com $N = 20$.

30 vert., 2 dim.

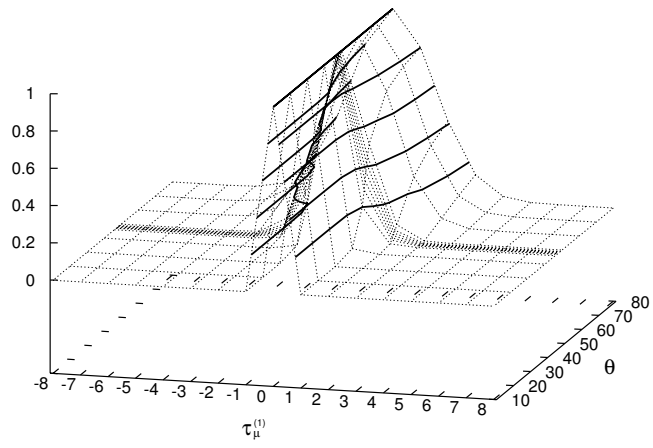


Figura A.6: Histograma para rede em $d = 2$ com $N = 30$.

40 vert., 2 dim.

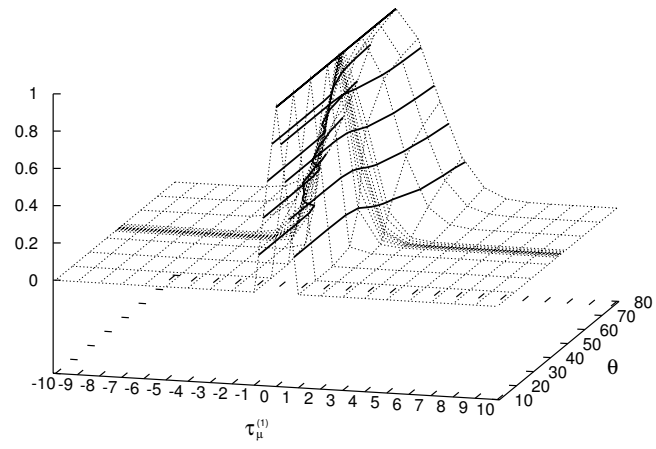


Figura A.7: Histograma para rede em $d = 2$ com $N = 40$.

50 vert., 2 dim.

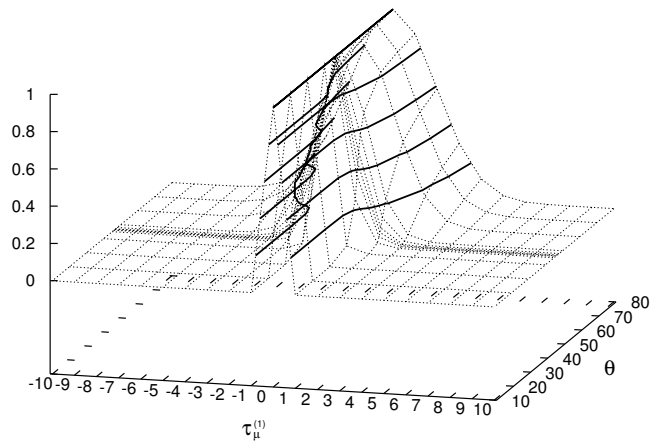


Figura A.8: Histograma para rede em $d = 2$ com $N = 50$.

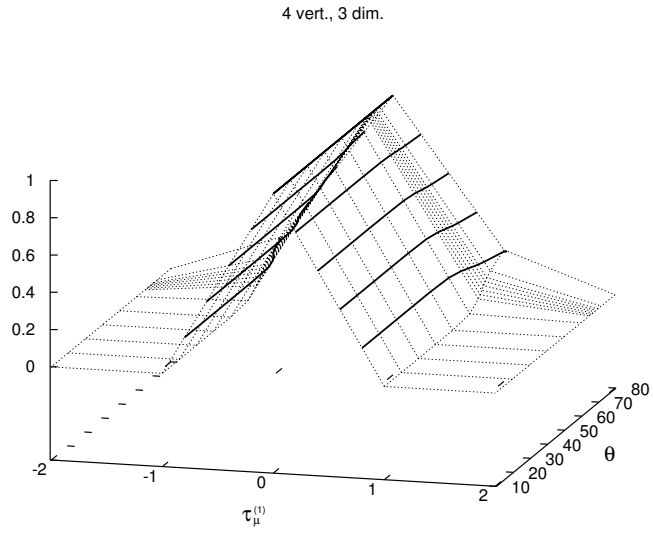


Figura A.9: Histograma para rede em $d = 3$ com $N = 4$.

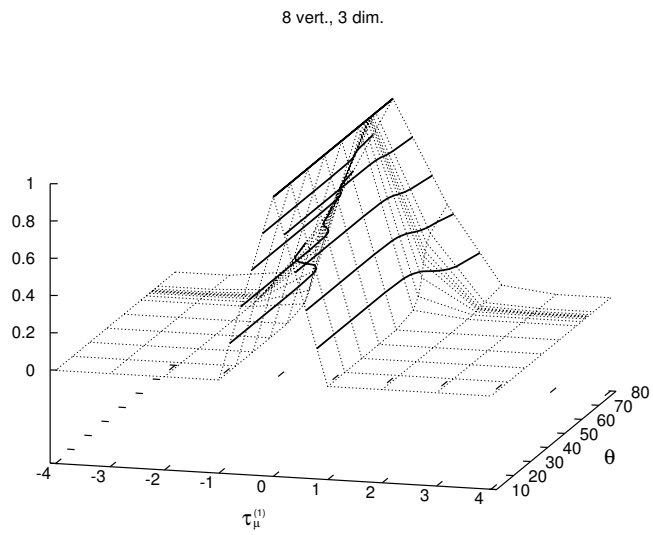


Figura A.10: Histograma para rede em $d = 3$ com $N = 8$.

12 vert., 3 dim.

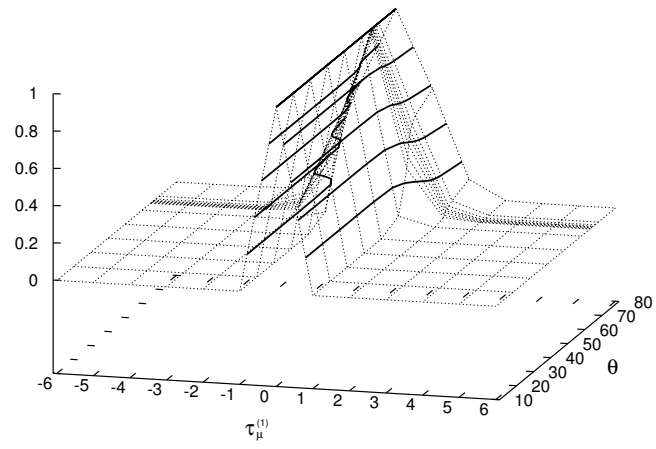


Figura A.11: Histograma para rede em $d = 3$ com $N = 12$.

16 vert., 3 dim.

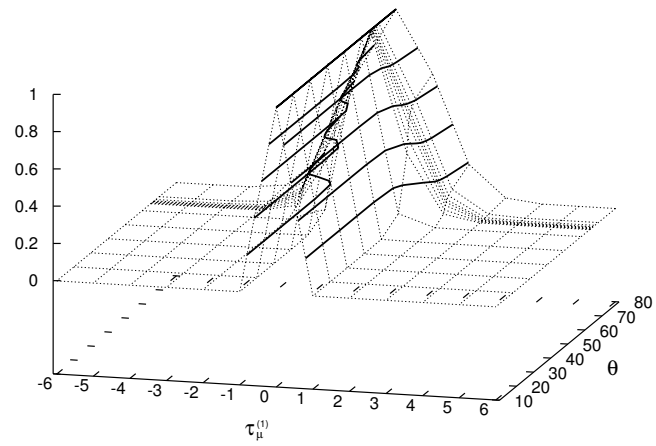


Figura A.12: Histograma para rede em $d = 3$ com $N = 16$.

20 vert., 3 dim.

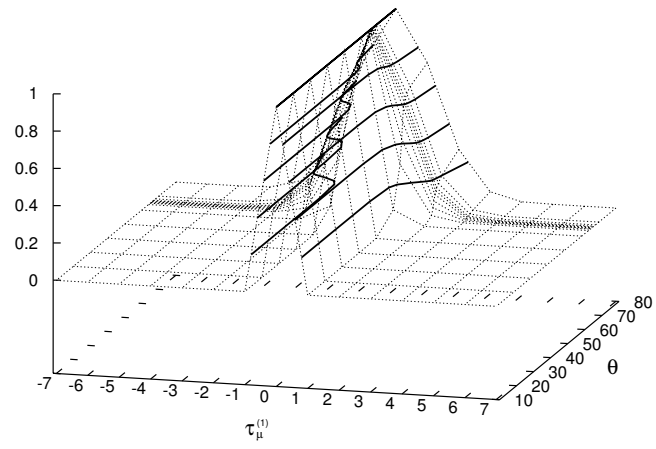


Figura A.13: Histograma para rede em $d = 3$ com $N = 20$.

6 vert., 4 dim.

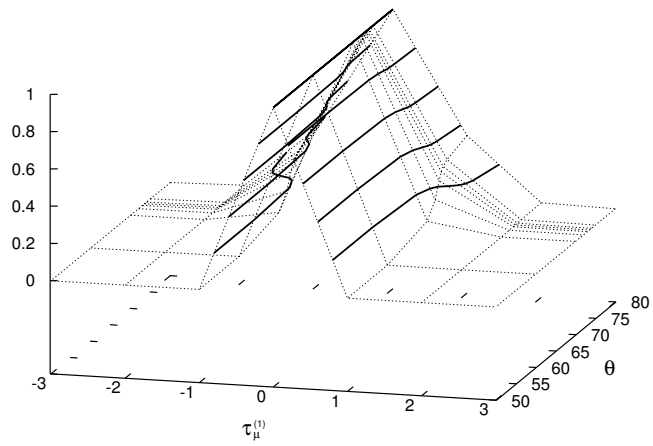


Figura A.14: Histograma para rede em $d = 4$ com $N = 6$.

8 vert., 4 dim.

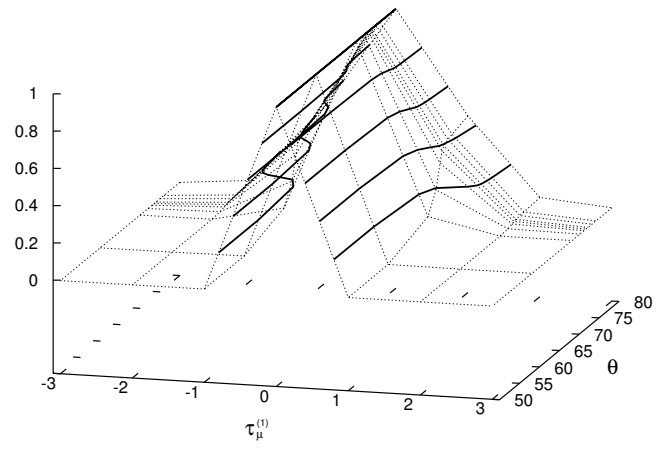


Figura A.15: Histograma para rede em $d = 4$ com $N = 8$.

10 vert., 4 dim.

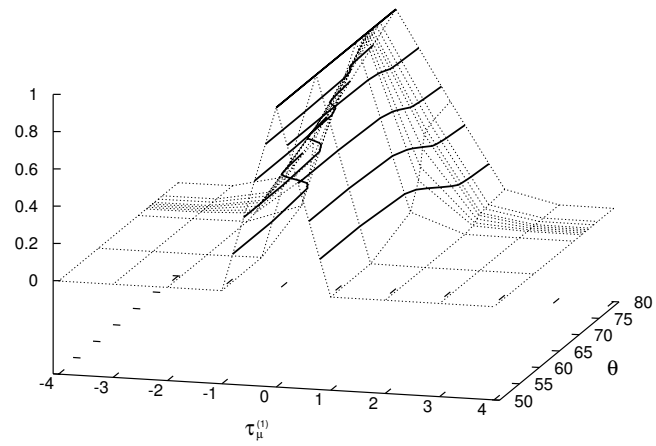


Figura A.16: Histograma para rede em $d = 4$ com $N = 10$.

12 vert., 4 dim.

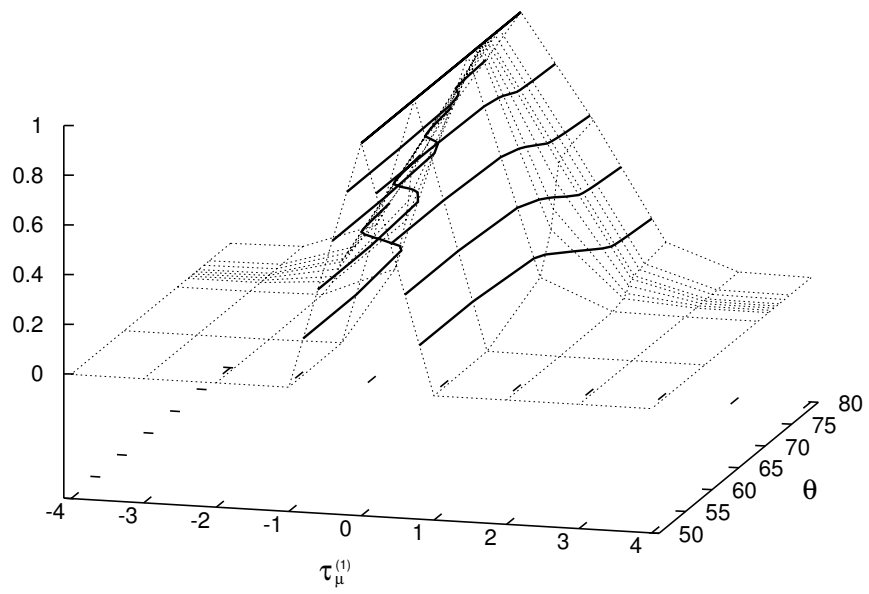


Figura A.17: Histograma para rede em $d = 4$ com $N = 12$.

A.3 Dispersões

Apresentam-se aqui os gráficos das dispersões $\langle \omega^{(1,2)} \rangle$ de todas as redes em 2, 3 e 4 dimensões.

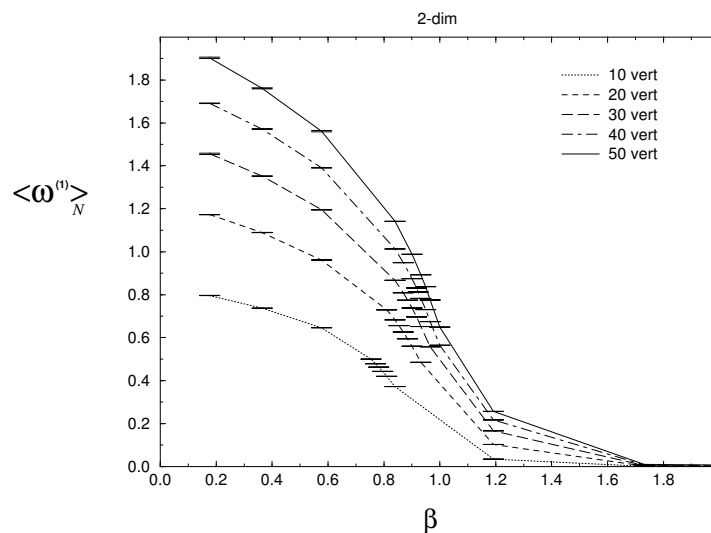


Figura A.18: Dispersões $\langle \omega^{(1)} \rangle_N$ em $d = 2$.

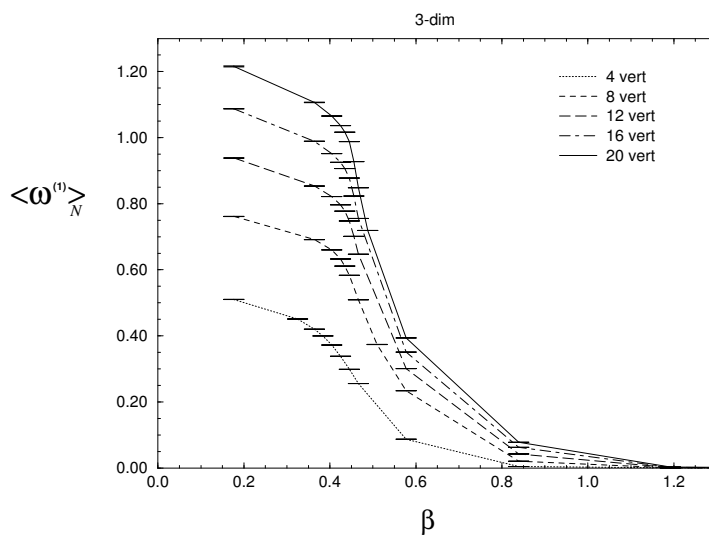


Figura A.19: Dispersões $\langle \omega^{(1)} \rangle_N$ em $d = 3$.

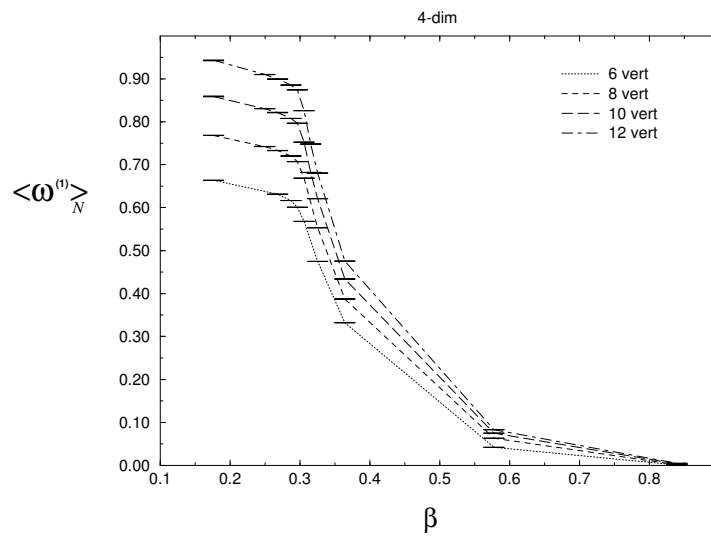


Figura A.21: Dispersões $\langle \omega^{(1)} \rangle_N$ em $d = 4$.

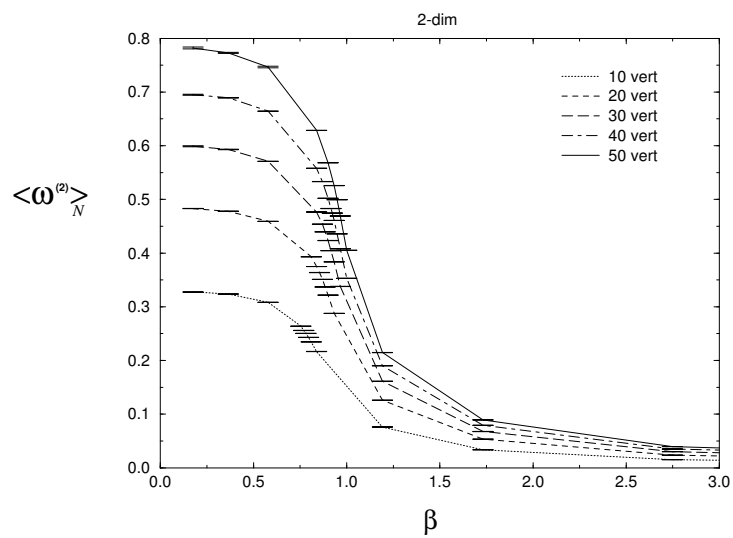


Figura A.22: Dispersões $\langle \omega^{(2)} \rangle_N$ em $d = 2$.

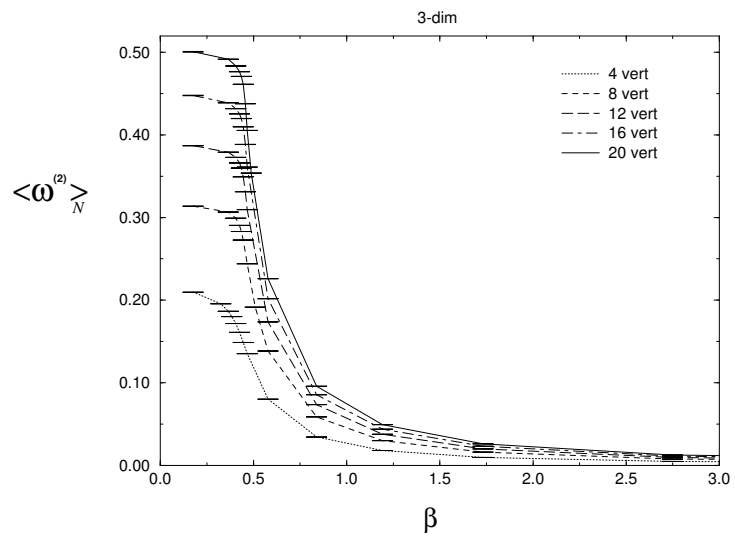


Figura A.23: Dispersões $\langle \omega^{(2)} \rangle_N$ em $d = 3$.

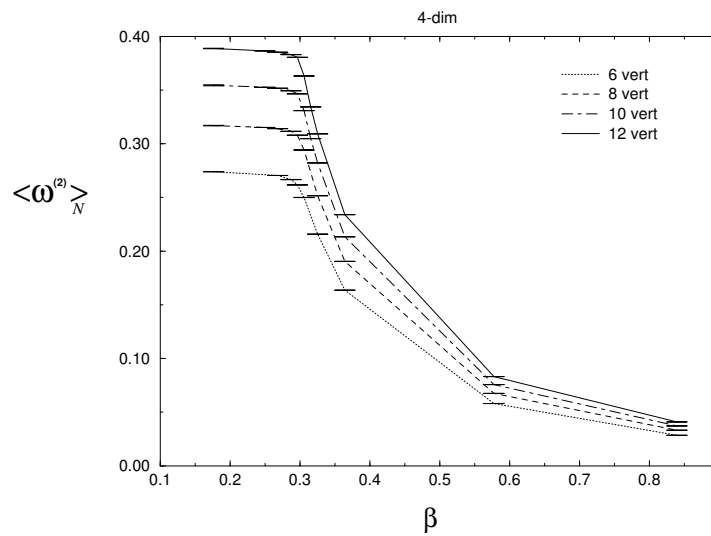


Figura A.24: Dispersões $\langle \omega^{(2)} \rangle_N$ em $d = 4$.

Apêndice B

Indução Alternativa dos Observáveis

Complementamos o estudo das possibilidades de medida dos winding numbers na rede fazendo uma nota sobre a construção dos observáveis e medidas alternativas. Esta é, ao mesmo tempo, uma transcrição resumida das discussões que nos levaram à realização do trabalho tal como é apresentado nesta dissertação.

Como é tratado o caso $SO(2)$, que é isomorfo ao grupo $U(1)$, pode-se representar o campo em um sítio pela fase complexa $\psi = e^{i\Theta(x_\mu)} = \psi_2(\Theta) + i\psi_1(\Theta) = \cos \Theta + i\sin \Theta$. A definição complexa dos campos ψ permite escrevê-los facilmente segundo a base de Fourier complexa, o que nos levou a considerar os coeficientes de Fourier como possíveis observáveis de interesse. Iniciamos descrevendo o aspecto da transformação para o espaço de momentos de uma rede com condições periódicas de contorno numa caixa de lado L .

As funções modais apropriadas para a transformação para o espaço de momentos são as fases complexas usuais,

$$f_p(x) = \exp\left(i\frac{2\pi k_1 x_1}{L} + \dots + i\frac{2\pi k_d x_d}{L}\right),$$

em que $p(k) = 2\pi(k_1, \dots, k_d)/L$, com $\nu = 1, \dots, d$ e $k_\nu = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$, discrimina os modos discretos do Laplaciano. Elas satisfazem as condições de ortonormalidade e completudeza

$$\int_0^L dx_1 \dots \int_0^L dx_d f_p^*(x) f_{p'}(x) = L^d \delta_{k_1 k'_1} \dots \delta_{k_d k'_d}, \quad (\text{B.1})$$

$$\sum_{k_1=1}^{\infty} \dots \sum_{k_d=1}^{\infty} f_p^*(x) f_p(x') = L^d \delta^d(x, x'). \quad (\text{B.2})$$

Como o uso dessas funções modais, a expressão para a transformada da função de Green numa caixa é, para a teoria livre,

$$\tilde{G}(p) = \langle \tilde{\phi}_i^*(p) \tilde{\phi}_i(p) \rangle = \frac{1}{p^2 + m^2},$$

na qual os quadrados dos momentos discretos são dados em termos dos modos por

$$p^2(k) = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 (k_1^2 + \dots + k_d^2).$$

Note-se que a função de Green tem a mesma forma que o propagador no espaço infinito. A única diferença é que os momentos a valores contínuos são trocados por um conjunto infinito mas discreto.

Na rede as autofunções do laplaciano são dadas por

$$f_p^N(x) = \exp\left(i\frac{2\pi k_1 j_1}{N} + \dots + i\frac{2\pi k_d j_d}{N}\right),$$

sendo $p(k)$ o mesmo de antes, $x(j) = a(j_1, \dots, j_d)$ e os inteiros podem ser escolhidos entre valores nos conjuntos finitos $j_\nu = 1, \dots, N$, e $k_\nu = 1, \dots, N$. As funções modais da rede satisfazem as relações de ortonormalidade e completeza

$$\begin{aligned} \sum_{j_1=1}^N \dots \sum_{j_d=1}^N f_p^{N*}(x) f_{p'}^N(x) &= N^d \delta_{k_1 k'_1} \dots \delta_{k_d k'_d}, \\ \sum_{k_1=1}^N \dots \sum_{k_d=1}^N f_p^{N*}(x) f_p^N(x') &= N^d \delta_{j_1 j'_1} \dots \delta_{j_d j'_d}. \end{aligned}$$

Note-se que as relações são igualdades *exatas* para cada N -rede. A transformação do campo para o espaço de momentos e sua inversa são escritas como

$$\tilde{\psi}_i(p) = \frac{1}{N^d} \sum_x^{N^d} f_p^N(x) \psi_i(x), \quad (\text{B.3})$$

$$\psi_i(x) = \sum_p^{N^d} f_p^{N*}(x) \tilde{\psi}_i(p), \quad (\text{B.4})$$

na qual as somas consistem de N^d termos, como denota simbolicamente o superscrito.

Na rede, os p^2 não são os autovalores exatos do laplaciano. Ao contrário, os autovalores são dados por ρ^2/a^2 , em que

$$\rho_k^2 = 4 \left[\sin^2\left(\frac{\pi k_1}{N}\right) + \dots + \sin^2\left(\frac{\pi k_d}{N}\right) \right].$$

Para N grande, todas as quantidades na rede convergem para as correspondentes quantidades no contínuo. Para o campo transformado $\tilde{\varphi}_i(p)$, a função de Green no espaço de momentos na rede depende de ρ^2/a^2 ao invés de p^2 ,

$$\tilde{G}_N(p) = \langle \tilde{\varphi}_i^*(p) \tilde{\varphi}_i(p) \rangle = \frac{1}{\rho_k^2/a^2 + m^2}.$$

Note-se que esta função de Green tem a mesma forma da função de Green na caixa, dada acima, mas com o conjunto infinito de momentos discretos trocado por um conjunto finito das correspondentes quantidades na rede.

Passamos a aplicar estas transformações no caso do modelo Sigma $SO(2)$. Definimos o observável

$$\mathcal{O}_\mu[\psi] = \frac{1}{2\pi i} \int_0^L dx_\mu \psi^* \partial_\mu \psi, \quad (\text{B.5})$$

que permite a obtenção dos winding numbers diretamente a partir dos campos. Escrevendo uma configuração como $\psi(x) = e^{i\Theta(x)}$, tem-se

$$\mathcal{O}_\mu[\psi] = \frac{1}{2\pi i} \int_0^L dx_\mu [e^{-i\Theta(x_\mu)}] i \partial_\mu \Theta(x_\mu) [e^{i\Theta(x_\mu)}] = \frac{1}{2\pi} \oint d_\mu \Theta,$$

equivalente a (3.7).

Em seguida, analisando o caso $d = 1$, usamos a versão de ψ no espaço de momentos, $\tilde{\psi}(k) = \tilde{\psi}_2(k) + i\tilde{\psi}_1(k)$, descrevendo os campos ψ pela base recíproca,

$$\psi(x) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(k) e^{-\frac{2i\pi}{L} x k}, \quad (\text{B.6})$$

segundo a fórmula (B.3). Da inserção de (B.6) em (B.5) deriva o observável

$$\mathcal{O}[\tilde{\psi}] = - \sum_{k=-\infty}^{+\infty} k \tilde{\psi}^*(k) \tilde{\psi}(k). \quad (\text{B.7})$$

Observemos agora o caso discreto, ainda em uma dimensão. Os limites da soma do observável (B.7) restringem-se agora ao intervalo $k = 1, \dots, N$.

Usando a definição (B.3) em (B.7), verificamos que o valor do observável passa a depender da escolha dos N inteiros consecutivos da soma, desrespeitando a periodicidade da rede. Isso é consequência da forma não periódica desse observável, devida à presença do argumento k . Um recurso para a solução desse problema é a substituição de k por uma função que mantenha suas características quando da tomada do limite do contínuo e implique, também, na periodicidade da rede,

$$k \rightarrow f(k) = \left(\frac{N}{2\pi}\right) \text{sen} \left(\frac{2\pi k}{N}\right). \quad (\text{B.8})$$

Quando $N \rightarrow \infty$, o argumento da função seno é pequeno e tende a $2\pi k/N$, de forma que $\lim_{N \rightarrow \infty} f(k) = k$. Agora, verifica-se também a invariância por escolha da base, dada a periodicidade da função seno.

Para implementarmos este observável seria necessário medir todas as fases de cada configuração, o que redundaria num problema técnico de limitação de memória das máquinas. Retornamos, então, ao espaço de configurações, analisando como a modificação (B.8) se comporta.

Escrevemos agora uma configuração genérica como $\psi(j) = e^{i\Theta_j}$ e reconstruímos o observável (B.7) usando a transformada (B.3) e a forma complexa de (B.8):

$$\begin{aligned}
\mathcal{O}[\Theta] &= -\frac{1}{4i\pi N} \sum_{j,m,k} e^{i(\Theta_m - \Theta_j)} e^{\frac{2i\pi}{N}(m-j)k} (e^{\frac{2i\pi}{N}k} - e^{-\frac{2i\pi}{N}k}) \\
&= -\frac{1}{4i\pi N} \sum_{j,m} e^{i(\Theta_m - \Theta_j)} (N\delta_{m,j-1} - N\delta_{m,j+1}) \\
&= \frac{1}{2\pi} \sum_{j=1}^N \text{sen}(\Theta_{j+1} - \Theta_j) = \frac{1}{2\pi} \sum_{\ell(\mu)}^N \text{sen}(\Delta_\ell \Theta) = \tau_\mu^{(2)}. \tag{B.9}
\end{aligned}$$

Obtivemos, assim, mais uma justificativa para a definição do observável $\tau_\mu^{(2)}$. Em redes finitas, este observável não é, geralmente, um número inteiro, embora o deva ser no limite do contínuo pois, para N suficientemente grande, $\text{sen}(\Delta\Theta) \approx \Delta\Theta$. No entanto, $\sum_j \Delta\Theta$ é inteiro, dadas as condições periódicas da rede, o que justifica também a implementação do observável $\tau_\mu^{(1)}$.

Podemos ainda generalizar esses observáveis para d dimensões. A extensão direta é análoga à construção de (B.9), montando-se a forma vetorial de (B.5):

$$(\mathcal{O}_1, \mathcal{O}_2, \dots, \mathcal{O}_d)[\psi] = \frac{1}{2\pi i L^{d-1}} \int_0^L dx_1 \dots \int_0^L dx_d (\psi^* \partial_{x_1} \psi, \dots, \psi^* \partial_{x_d} \psi).$$

Procedendo de forma semelhante à do caso unidimensional, chegamos a:

$$(\mathcal{O}_1, \mathcal{O}_2, \dots, \mathcal{O}_d)[\psi] = -\frac{N}{2\pi} \sum_{k_1} \dots \sum_{k_d} \tilde{\psi}^*(k) \tilde{\psi}(k) \left[\text{sen} \left(\frac{2\pi k_1}{N} \right), \dots, \text{sen} \left(\frac{2\pi k_d}{N} \right) \right].$$

Considerando, mais uma vez, a forma $\psi(\Theta) = e^{i\Theta}$, com $\Theta = \Theta(j_1, \dots, j_d)$, e usando a forma complexa dos senos, temos para a μ -ésima componente de \mathcal{O} ,

$$\mathcal{O}_\mu[\psi] = \frac{1}{2\pi N^{d-1}} \sum_{\ell(\perp\mu)} \text{sen}[\Delta_\ell(\Theta)], \tag{B.10}$$

em que a soma deve ser efetuada sobre todos os links em todas as seções perpendiculares a μ . Logo, o observável (B.10) apresenta características de uma média dos winding numbers em cada linha da rede na μ -ésima direção, o que sugeriu a implementação dos observáveis (3.10). Ressaltamos que, sendo o interesse maior a verificação da formação de topologia bem definida, optamos pela utilização de $\omega^{(1,2)}$, derivados de $\tau_\mu^{(1,2)}$.

Há várias outras possibilidades para a avaliação da existência de topologia no modelo usado. Ao longo das discussões sobre os possíveis observáveis a serem implementados no programa, duas interessantes sugestões foram cogitadas. A primeira, pelo Dr. André C. R. Martins, implicava na observação da evolução temporal do sistema, colocando-se condições fixas de contorno nos extremos da direção do tempo, com $\omega^{(1,2)} \neq 0$. Perguntávamos se as configurações se sustentariam em condições topologicamente não triviais, ou mesmo se haveria definição de topologia na proximidade do ponto crítico. A segunda sugestão, feita pelo professor Dr. Paulo Teotônio Sobrinho (DFMA - IFUSP),

responderia à seguinte pergunta: caso não haja topologia definida no ponto crítico, quanto o modelo deve ser alterado para que isso ocorra? Ou seja, forçaríamos o modelo a apresentar configurações topológicas definidas na região da criticalidade, adicionando à ação um termo proporcional à dispersão $\gamma\omega^{(1)}$. Essa modificação talvez pudesse ser interpretada como uma caminhada forçada para a região de simetria quebrada do modelo original, o que não garantiria uma topologia não-trivial, de qualquer modo. Essas alternativas não foram levadas a cabo pois muito mais tempo de simulação seria exigido e várias mudanças no algoritmo seriam necessárias. Por exemplo, para a primeira sugestão, deveríamos fazer alterações importantes no sistema de indexação da rede, previamente desenvolvido para condições periódicas em todas as direções e, no caso da segunda proposta, o modelo passaria a contar com mais um parâmetro γ , obrigando-nos a mapear um espaço de dois parâmetros, além de modificar a parte do programa relativa à atualização dos clusters.

Apêndice C

Balanço Detalhado no Algoritmo de Wolff

Apresenta-se aqui a demonstração para modelos Sigma $O(\mathcal{N})$ de que o balanço detalhado é obedecido pelo algoritmo de cluster de Wolff.

Por simplicidade, reescreve-se a ação do modelo discreto,

$$\begin{aligned} S_N[\psi] &= \frac{\beta}{2} \sum_{\ell} (\Delta_{\ell} \vec{\psi})^2 = \frac{\beta}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (\vec{\psi}_j - \vec{\psi}_i)^2 \\ &= \frac{\beta}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} (2 - 2\vec{\psi}_i \cdot \vec{\psi}_j) \rightarrow S_N[\psi] = -\beta \sum_{\langle i,j \rangle} (\vec{\psi}_i \cdot \vec{\psi}_j). \end{aligned} \quad (\text{C.1})$$

O subscrito $\langle i, j \rangle$ indica que a operação é efetuada sobre o link que une dois primeiros vizinhos, $\vec{\psi}_i$ e $\vec{\psi}_j$. Como antes, a probabilidade de transição do cluster de uma configuração C para outra C' é $\mathcal{W}_{C \rightarrow C'}$. O conjunto de links que pertencem ao cluster é representado por \mathcal{C} e o conjunto dos links da borda do cluster, por $\partial\mathcal{C}$. Denota-se ℓ_+ o link que satisfaz $2\beta(\vec{\psi}_j \cdot \hat{r})(\vec{\psi}_m \cdot \hat{r}) > 0$, isto é, o link que tem probabilidade de ser ativado, enquanto ℓ_- representa a condição $2\beta(\vec{\psi}_j \cdot \hat{r})(\vec{\psi}_m \cdot \hat{r}) \leq 0$.

De acordo com a probabilidade (4.5), pode escrever-se a probabilidade de que um link $\ell(i, j)$ seja ativado como

$$\mathcal{P}_{\ell_+} = 1 - \exp \left[-2\beta(\vec{\psi}_i \cdot \hat{r})(\vec{\psi}_j \cdot \hat{r}) \right].$$

Sendo $\mathcal{P}_{i \in \mathcal{C}}$ a probabilidade de se sortear um sítio i de um cluster \mathcal{C} , a probabilidade de se construir este cluster começando-se no sítio i é

$$\mathcal{P}_{\mathcal{C}_i} = \mathcal{P}_{i \in \mathcal{C}} \left(\prod_{\ell_+ \in \mathcal{C}} \mathcal{P}_{\ell_+} \right) \left[\prod_{\ell_+ \in \partial\mathcal{C}} (1 - \mathcal{P}_{\ell_+}) \right].$$

Logo, a probabilidade total de se construir o cluster é dada pela soma $\sum_{i \in \mathcal{C}} \mathcal{P}_{\mathcal{C}_i}$, que pode ser interpretada como a probabilidade de transição $C \rightarrow C'$, isto é,

$$\mathcal{W}_{C \rightarrow C'} = \left(\sum_{i \in \mathcal{C}} \mathcal{P}_i \right) \left(\prod_{\ell_+ \in \mathcal{C}} \mathcal{P}_{\ell_+} \right) \left[\prod_{\ell_+ \in \partial \mathcal{C}} (1 - \mathcal{P}_{\ell_+}) \right]. \quad (\text{C.2})$$

Observe-se agora a transição $C' \rightarrow C$, cuja probabilidade deve ser, analogamente a (C.2),

$$\mathcal{W}_{C' \rightarrow C} = \left(\sum_{i \in \mathcal{C}'} \mathcal{P}_i \right) \left(\prod_{\ell_+ \in \mathcal{C}'} \mathcal{P}_{\ell_+} \right) \left[\prod_{\ell_+ \in \partial \mathcal{C}'} (1 - \mathcal{P}_{\ell_+}) \right]. \quad (\text{C.3})$$

Ao ser efetuada a reflexão do cluster, os links $\ell_+ \in \mathcal{C}$ passam a pertencer ao cluster \mathcal{C}' , correspondente à nova configuração C' , de modo que as somas e produtos sobre os links no interior dos clusters são iguais. No entanto, os links $\ell_+ \in \partial \mathcal{C}$ tornam-se os links $\ell_- \in \partial \mathcal{C}'$ e vice-versa, $\ell_+ \in \partial \mathcal{C}' \rightarrow \ell_- \in \partial \mathcal{C}$. A razão entre as probabilidades de transição é, portanto,

$$\frac{\mathcal{W}_{C \rightarrow C'}}{\mathcal{W}_{C' \rightarrow C}} = \frac{\prod_{\ell_+ \in \partial \mathcal{C}} (1 - \mathcal{P}_{\ell_+})}{\prod_{\ell_+ \in \partial \mathcal{C}'} (1 - \mathcal{P}_{\ell_+})} = \frac{\prod_{\ell_+ \in \partial \mathcal{C}} \left\{ \exp \left[-2\beta(\vec{\psi}_i \cdot \hat{r})(\vec{\psi}_j \cdot \hat{r}) \right]_{\ell(i,j)} \right\}}{\prod_{\ell_+ \in \partial \mathcal{C}'} \left\{ \exp \left[-2\beta(\vec{\psi}_i \cdot \hat{r})(\vec{\psi}_j \cdot \hat{r}) \right]_{\ell(i,j)} \right\}}.$$

Usam-se, agora, as relações de troca, $\ell_+ \in \partial \mathcal{C}' \rightarrow \ell_- \in \partial \mathcal{C}$ e $\ell_+ \in \partial \mathcal{C} \rightarrow \ell_- \in \partial \mathcal{C}'$, notando-se que, devido às definições de ℓ_+ e ℓ_- , os expoentes devem mudar de sinal. Tem-se, assim,

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{W}_{C \rightarrow C'}}{\mathcal{W}_{C' \rightarrow C}} &= \frac{\prod_{\ell_+ \in \partial \mathcal{C}} (1 - \mathcal{P}_{\ell_+})}{\prod_{\ell_+ \in \partial \mathcal{C}'} (1 - \mathcal{P}_{\ell_+})} = \frac{\prod_{\ell_+ \in \partial \mathcal{C}} e^{-\beta(\vec{\psi}_i \cdot \hat{r})(\vec{\psi}_j \cdot \hat{r})} \prod_{\ell_- \in \partial \mathcal{C}'} e^{\beta(\vec{\psi}_i \cdot \hat{r})(\vec{\psi}_j \cdot \hat{r})}}{\prod_{\ell_+ \in \partial \mathcal{C}'} e^{-\beta(\vec{\psi}_i \cdot \hat{r})(\vec{\psi}_j \cdot \hat{r})} \prod_{\ell_- \in \partial \mathcal{C}} e^{\beta(\vec{\psi}_i \cdot \hat{r})(\vec{\psi}_j \cdot \hat{r})}} \\ &= \frac{\prod_{\ell_{\pm} \in \partial \mathcal{C}'} \exp \left\{ \left[\beta(\vec{\psi}_i \cdot \hat{r})(\vec{\psi}_j \cdot \hat{r}) \right]_{\ell_+} + \left[\beta(\vec{\psi}_i \cdot \hat{r})(\vec{\psi}_j \cdot \hat{r}) \right]_{\ell_-} \right\}}{\prod_{\ell_{\pm} \in \partial \mathcal{C}} \exp \left\{ \left[\beta(\vec{\psi}_i \cdot \hat{r})(\vec{\psi}_j \cdot \hat{r}) \right]_{\ell_+} + \left[\beta(\vec{\psi}_i \cdot \hat{r})(\vec{\psi}_j \cdot \hat{r}) \right]_{\ell_-} \right\}} \\ &= \frac{\prod_{\ell \in \partial \mathcal{C}'} \exp \left[\beta(\vec{\psi}_i \cdot \hat{r})(\vec{\psi}_j \cdot \hat{r}) \right]_{\ell}}{\prod_{\ell \in \partial \mathcal{C}} \exp \left[\beta(\vec{\psi}_i \cdot \hat{r})(\vec{\psi}_j \cdot \hat{r}) \right]_{\ell}}. \end{aligned}$$

Os fatores $(\vec{\psi}_i \cdot \hat{r})(\vec{\psi}_j \cdot \hat{r})$ correspondem ao produto das componentes dos campos paralelas à direção \hat{r} . Como as componentes perpendiculares a \hat{r} são iguais para os campos antes e após a transformação, pode multiplicar-se o numerador e o denominador pelo produto

$$\prod_{\ell \in \partial \mathcal{C}'} \exp \left\{ \psi_{[\perp \hat{r}(\ell_+)]} \psi_{[\perp \hat{r}(\ell_-)]} \right\},$$

recuperando-se o produto escalar dos campos,

$$\frac{\mathcal{W}_{C \rightarrow C'}}{\mathcal{W}_{C' \rightarrow C}} = \frac{\prod_{\ell \in \partial C'} \exp \left[\beta (\vec{\psi}_i \cdot \vec{\psi}_j)_{\ell(i,j)} \right]}{\prod_{\ell \in \partial C} \exp \left[\beta (\vec{\psi}_i \cdot \vec{\psi}_j)_{\ell(i,j)} \right]}.$$

Multiplicando-se também pelos fatores correspondentes ao interior e ao exterior de cada cluster, que são iguais, consegue-se

$$\frac{\mathcal{W}_{C \rightarrow C'}}{\mathcal{W}_{C' \rightarrow C}} = \frac{\prod_{\ell \in C'} \exp \left[\beta (\vec{\psi}_i \cdot \vec{\psi}_j)_{\ell(i,j)} \right]}{\prod_{\ell \in C} \exp \left[\beta (\vec{\psi}_i \cdot \vec{\psi}_j)_{\ell(i,j)} \right]} = \frac{\exp \left[\beta \sum_{\ell \in C'} (\vec{\psi}_i \cdot \vec{\psi}_j)_{\ell(i,j)} \right]}{\exp \left[\beta \sum_{\ell \in C} (\vec{\psi}_i \cdot \vec{\psi}_j)_{\ell(i,j)} \right]}.$$

Dada a forma (C.1) da ação, a razão se torna

$$\frac{\mathcal{W}_{C \rightarrow C'}}{\mathcal{W}_{C' \rightarrow C}} = \frac{e^{-S'}}{e^{-S}} = e^{-\Delta S},$$

o que completa a demonstração.

Referências Bibliográficas

- [1] deLYRA, Jorge L., FOONG, S.K., GALLIVAN, T.E., “Differentiability and Continuity of Quantum Fields on a Lattice”, *Phys. Rev.* D46, pp. 476-484, 1991.
- [2] 't Hooft, G., *Nuclear Physics*, B33, p. 173; B35, 167.
- [3] WILSON, Keneth G., “Confinement of Quarks”, *Phys. Rev.* D10, 2445-2459, 1974. Para uma introdução às teorias de gauge na rede, recomenda-se a leitura de *Lattice Gauge Theories and Monte Carlo Simulations*, de Claudio REBBI (World Scientific, 1983), em que se encontram reimpressos vários artigos relativos, inclusive este de Wilson, após uma introdução geral ao assunto pelo próprio Rebbi.
- [4] FEYNMAN, Richard P., e HIBBS, A.R., *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill, 1965.
- [5] LE BELLAC, Michel, *Quantum and Statistical Field Theory*, Oxford Science Publications, 1991.
- [6] deLYRA, Jorge L., MARTINS, André C.R., “Symmetry Breaking on a Finite Euclidean Lattice”, *Nuclear Physics* B432, pp. 621-640, 1994.
- [7] deLYRA, Jorge L., FOONG, S.K., GALLIVAN, T.E., “Finite Lattice Systems with True Critical Behaviour”, *Phys. Rev.* D46, pp. 1643-1657, 1992.
- [8] GRADSHTEYN, I. S., e RYZHIK, I. M., *Table of Integrals, Series and Products*, 40.^o ed., Academic Press, 1965, fórmula 3.462, equação 1, e fórmula 3.461, equações 2 e 3, pp. 337.
- [9] *Ibid.*[8], fórmula 9.246, equação 2, pp. 1065-1066.
- [10] COLEMAN, Sidney, *Aspects of Symmetry*, Cambridge Press, 1985.
- [11] KAKU, Michio, *Quantum Field Theory - A Modern Introduction*, Oxford University Press, 1993.
- [12] FULTON, William, *Algebraic Topology - A first Course*, Springer-Verlag, 1995.
- [13] HAMMERSLEY, J.M., e HANDSCOMB, D.C., *Monte Carlo Methods*, Chapman and Hall, 1979.

- [14] WOLFF, Ulli, “Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems”, *Phys. Rev. Lett.*, v.62, n.º 4, 1989.
- [15] WANG, Jian-Sheng, e SWENDSEN, Robert H., “Cluster Monte Carlo Algorithms”, *Physica A*, 167, 565-567, 1990.
- [16] BINNEY, J.J., DOWRICK, N.J., FISHER, A.J., e NEWMAN, M.E.J., *The Theory of Critical Phenomena*, Oxford Science Publications, 1992.