

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE FÍSICA

Comportamento infravermelho do propagador do glúon na rede *

André Ribeiro Taurines

Tese realizada sob a orientação do Prof. Dr. César Augusto Zen Vasconcellos e co-orientação do Prof. Dr. Attilio Cucchieri, e apresentada ao Instituto de Física da UFRGS em preenchimento parcial dos requisitos para a obtenção do título de Doutor em Física.

Porto Alegre
2003

* Trabalho financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).



a meu avô Demétrio

Agradecimentos

- aos doutores Attilio Cucchieri e Tereza Mendes, pelo *inestimável* auxílio na elaboração deste trabalho;
- ao professor Gastão Krein, pelo estímulo, ensinamentos e oportunidades;
- aos professores César Vasconcellos e Manuel Malheiro, pela tolerância, compreensão e incentivo;
- aos professores do IF-UFRGS, pelos ensinamentos, em particular aos professores Horacio Girotti, Maria Beatriz Gay e Victória Herscovitz, por me apresentarem à beleza dos campos;
- ao Instituto de Física de São Carlos (IFSC-USP) e ao Instituto de Física Teórica (IFT-UNESP), pela hospitalidade;
- aos colegas da sala M208, pelo ambiente agradável e estimulante nesses anos de pós-graduação;
- a Alysson, Evy e Henrique, pelas inúmeras conversas e esclarecimentos em Física e Computação;
- a Evy e Henrique, pela montagem do sistema de computação da pós-graduação, contando com poucos recursos, excelentes idéias e muita boa vontade;
- aos responsáveis pela pilha de pc's Mate, do IF-UFRGS, onde foi possível dar os primeiros passos em cálculos em paralelo;
- a Gian, Wanderson e Amilton, pela camaradagem na hora necessária;
- a minha família, pelo apoio contínuo e incondicional;
- à Verônica, por existir tão alegremente.

Resumo

Investigamos o comportamento infravermelho do propagador do glúon, no calibre de Landau, em três dimensões ($2 + 1$) para teoria Yang-Mills $SU(2)$ (YM_3^2) usando simulações em redes euclidianas de grande volume ($40^3, 80^3, 140^3$). Obtemos indicações bastante fortes de que esse propagador tende a um valor finito para momentum nulo, decrescendo, a partir de $\sim 350 MeV$, com expoente crítico $\kappa \sim 0.6$. Comparações com previsões analíticas não-perturbativas mostram boa concordância e sugerem a existência de pólos imaginários no propagador. Obtemos clara evidência de violação de positividade em YM_3^2 , condição suficiente para o confinamento de cor.

Abstract

We investigate the infrared behaviour of the gluon propagator, in the Landau gauge, for three-dimensional $(2 + 1)$ Yang-Mills $SU(2)$ theory (YM_3^2) using numerical simulations on Euclidean lattices at large volumes $(40^3, 80^3, 140^3)$. We obtain strong indications that this propagator goes to a finite value at vanishing momentum, starting to decrease at $\sim 350 \text{ MeV}$ with a critical exponent $\kappa \sim 0.6$. Comparisons with analytical non-perturbative predictions show good agreement and suggest the existence of imaginary poles in the propagator. We obtain clear evidence of positivity violation in YM_3^2 , a sufficient condition for color confinement.

Índice

Introdução	1
1. De modelos de spins a teorias de calibre na rede	4
1.1 Introdução	4
1.2 Modelos de spins e Invariância de Calibre	5
1.2.1 Modelo de Ising e Fenômenos Críticos	5
1.2.2 Modelo Relógio e XY	8
1.2.3 Modelos de spins com invariância de calibre local	9
1.3 Teorias de campos de calibre na rede	10
1.3.1 A rede	11
1.3.2 Elos e Plaquetas	11
1.3.3 Ação de Wilson e ação melhorada	13
1.3.4 Observáveis	14
1.3.5 Limite do Contínuo	16
1.4 Modelo exatamente solúvel para $SU(2)$ em 1+1	18
2. Propagador do glúon	24
2.1 Introdução	24
2.2 Propagador do glúon	25
2.2.1 Comportamento Ultravioleta	32
2.2.2 Comportamento Infravermelho	33
2.2.3 Divergência	35
2.2.4 Finitude e Anulamento	36
2.3 Confinamento: Kugo-Ojima e Zwanziger-Gribov	38
2.4 Propagador do glúon na rede	39
2.4.1 Fixação de calibre na rede	41
2.5 QCD com duas cores, sem quarks e em 2+1 dimensões	41
2.6 Estágio das simulações do propagador do glúon na rede	44
2.6.1 Calibre de Landau	44
2.6.2 Calibre de Coulomb	46
2.6.3 Calibre Laplaciano	47
2.6.4 Fixação de calibre na quantização estocástica	47

3. Simulações	50
3.1 Introdução	50
3.2 Método de Monte Carlo	51
3.2.1 Integrais multidimensionais	51
3.2.2 Ensembles	56
3.2.3 Estimativa de erro	59
3.2.4 Geradores de números aleatórios (GNA)	63
3.3 Métodos de Atualização	65
3.3.1 Algoritmo de Metropolis	66
3.3.2 Banho Térmico	69
3.3.3 Sorteio de matrizes $SU(2)$	70
3.3.4 Sobre-relaxação	73
3.4 Métodos de minimização	74
3.4.1 Método da sobre-relaxação estocástica	75
3.4.2 Método de Cornell	76
3.5 Paralelização	77
3.5.1 Pilha de pc's	77
3.5.2 Paralelizando com MPI	78
3.5.3 Construção dos grampos e cruzes	81
3.6 Sumário dos passos	83
4. Resultados	85
4.1 Introdução	85
4.2 Resultados das simulações	85
4.2.1 Colapso de dados	92
4.2.2 Propagador do glúon na rede em momentum zero	93
4.3 Ajuste a formas analíticas	93
4.3.1 Transformada parcial de Fourier	95
4.4 Performance computacional	98
4.4.1 Aumento da performance a volume fixo	106
4.4.2 Aumento de performance a volume variável	107
Conclusão e Perspectivas	111
A. Notação e Convenções	112
B. Detalhes de contas	119
B.1 Integrais para modelo solúvel	119
B.2 Propriedades do gerador funcional	121
B.3 Forma geral para o propagador do glúon	122
B.4 Propagador do glúon na rede no espaço de momenta	124
B.5 Funcional de elos e Calibre de Landau	125
B.6 Da ação de Wilson aos grampos	127
B.7 Projeção de matrizes em $SU(2)$	128

B.8	Algoritmo de Kennedy-Pendleton	129
B.9	Transformada parcial de Fourier para formas analíticas conhecidas	130
B.10	Transformada discreta de Fourier	133
C.	Simulação serial com O.H.Q.	136
C.1	Simulação serial com oscilador harmônico quântico	136
C.1.1	Teoria	136
C.1.2	Simulação	139
	Referências	146

Introdução

A teoria quântica de campos [1–8] tem sofrido nos últimos anos uma mudança de enfoque: grande parte das pesquisas não se encontra mais no uso do método da expansão perturbativa, mas está se concentrando na análise do regime não-perturbativo.

Isto se deve principalmente à existência, neste regime, de fenômenos cruciais para a verificação de que as teorias de calibres realmente descrevem o mundo físico regido pelas interações eletrofraca e forte. Em particular, à *Cromodinâmica Quântica* (QCD¹) [9], atual teoria predominante na descrição das interações fortes, ainda falta uma descrição satisfatória de fenômenos importantes, como *confinamento* e *quebra espontânea de simetria quiral*. Seus maiores sucessos concentram-se no regime perturbativo onde a teoria é analiticamente tratável: liberdade assintótica, processos de Drell-Yan, aniquilamento e^+e^- , espalhamento fóton-fóton, etc [7], são todos exitosamente descritos por esta teoria, mas em um regime no qual as flutuações quânticas são pequenas. O confinamento, por exemplo, encontra-se em uma região na qual espera-se que a teoria forneça uma constante de acoplamento grande; assim, é inconsistente usar a perturbação neste caso.

O regime não-perturbativo ainda é território árido para os teóricos, pois seu entendimento consiste quase sempre na resolução exata do problema. Mencionamos como exemplos a teoria super-simétrica $N = 2$ em 4D de Witten-Seiberg [10], a gravidade em 3D [11] e os vários modelos exatamente solúveis em 2D [12]. Entre estes últimos está o conhecido modelo de Schwinger [13], ou seja, eletrodinâmica quântica não-massiva em duas dimensões: o confinamento encontrado neste modelo ainda serve de paradigma para o entendimento deste fenômeno em outras teorias.

Entre os métodos analíticos mais utilizados para este regime estão as *equações de Dyson-Schwinger* [14–17]. Estas constituem um sistema de equações diferenciais que acoplam todas as funções de Green da teoria entre si: uma função de 2-pontos depende da função de 3 e 4-pontos, enquanto estas por sua vez são expressas em termos de funções de maior grau ainda; este padrão se repete infinitamente. É claro que um estudo analítico com esta abordagem exige algum tipo de truncamento, o que tem sido feito com bastante arbitrariedade levando a previsões bastante díspares [18].

De outro lado, aparecem os métodos numéricos de resolução do problema, sendo a *rede euclidiana* a mais utilizada [19–22]. Nesta técnica, o espaço-tempo euclidiano é discretizado e a integral funcional torna-se, além de bem definida matematicamente, um produto *finito* de integrais. O que começou como um artifício matemático de regularização para sugerir o confinamento no regime não-perturbativo, tornou-se uma teoria bastante formalizada e foi estendida para outras teorias quânticas de campos [23–25]. Embora seja um formalismo

¹ *Quantum Chromodynamics*

bastante poderoso para cálculos analíticos, os maiores impactos da rede euclidiana surgiram a partir de sua utilização em simulações numéricas. Os resultados obtidos com estas simulações adquiriram um status de *quase-experimento*, pelos quais as abordagens analíticas deveriam se guiar.

Neste trabalho, investigamos numericamente, na rede euclidiana, a função de Green bosônica de 2-pontos de uma teoria de calibre não-abeliana $SU(2)$ em $2+1$ dimensões, sem férmions (denotamos esta teoria por YM_3^2). Na QCD, férmions (quarks) interagindo através de bósons de grupo de calibre não-abeliano $SU(3)$ (glúons) em $3+1$ dimensões, esta função de 2-pontos seria o *propagador do glúon* e assim a ela nos referiremos no restante desta tese. No calibre de Landau temos ainda a função de 2-pontos dos campos fantasmas, o *propagador do fantasma*, provenientes da exponenciação do determinante de Fadeev-Popov.

A compreensão do comportamento destes dois propagadores na região do infravermelho é de fundamental importância no cenário de confinamento de *Zwanziger-Gribov* [26,27] e no, muito relacionado, critério de *Kugo-Ojima* [28]. Estas abordagens tentam descrever o confinamento de cor em termos da estrutura analítica dos propagadores; no infravermelho, um propagador fantasma divergente e um propagador do glúon finito ou nulo seriam condições suficientes para o confinamento. Um propagador do glúon desta forma violaria a positividade da função espectral [29, 30] dos glúons transversos, revelando seu caráter confinado.

A resolução das EDS do glúon constitui a principal ferramenta analítica na investigação desta região, mas as arbitrariedades nos truncamentos levam a resultados muito diversos: divergente, finito ou nulo, ou seja, todos os resultados possíveis [31]. Recentemente, começou-se a descartar a possibilidade de divergência, mas ainda não se pode seguramente escolher entre as duas últimas opções [18]. A investigação realizada através de simulações aparece para complementar esta pesquisa [31].

O estudo da região infravermelha na rede euclidiana exige a utilização de redes bastante grandes; o menor momento não nulo que podemos acessar numa simulação é proporcional a L^{-1} , o inverso do lado da rede. De fato, simulações do propagador do glúon feitas em redes não suficientemente grandes escondem o decréscimo dessa grandeza no infravermelho, como mostraremos nesta tese.

Para acessar essas redes, necessariamente muito grandes, optamos pelo estudo da teoria YM_3^2 [32], muito mais leve computacionalmente que a realística YM_4^3 [33]. Realizamos *apenas* a simulação do propagador do glúon, visto que o cálculo do propagador fantasma envolveria um passo extra demasiadamente pesado computacionalmente, a inversão de matrizes enormes. Daremos justificativas de por que nossos cálculos numéricos em YM_3^2 também servem para convalidar as idéias do cenário de confinamento dos glúons acima descrito.

Comparações com resultados analíticos são feitas, enfatizando a boa descrição de nossos resultados conseguida com uma forma tipo-Gribov, ou seja, com pólos imaginários no propagador. Salientamos que as grandes redes simuladas neste trabalho permitem, *pela primeira vez*, uma *análise quantitativa do expoente crítico*, ou seja, medir quão rápido o propagador do glúon decresce no infravermelho [34].

Mesmo utilizando a teoria YM_3^2 as simulações continuam sendo extremamente dispendiosas. Para realizá-las utilizamos uma *pilha de 16 pc's* rodando por três meses. Como as redes são muito grandes foi necessário *paralelizar o programa*, para que a rede fosse dividida e distribuída pelos diferentes pc's da pilha, cabendo desta forma na memória de acesso rápido local (memória RAM), com uma folga apropriada.

No capítulo 1 introduzimos conceitos e modelos da mecânica estatística e estado sólido que levaram à motivação original da construção de teorias de calibres na rede: vamos desde o modelo de spin mais simples, o modelo de Ising, até a original ação discretizada utilizada por Wilson [19]. Apresentamos alguns observáveis que aparecem frequentemente nas simulações de teorias de calibre na rede e discutimos como se acessa o limite contínuo nestas teorias, com vistas a comparações com dados experimentais. Para ilustrar claramente o que está sendo feito com os conceitos novos introduzidos (elos e plaquetas), resolvemos exatamente o caso de uma teoria de calibre discretizada em duas dimensões com condições de contorno livres.

Após uma rápida revisão sobre teorias de calibre na métrica euclidiana e suas EDS, discutimos no capítulo 2 as diferentes previsões analíticas para o propagador do glúon. Em conexão com o problema das cópias de Gribov apresentamos o cenário de confinamento acima mencionado no qual o propagador gluônico é fundamental. Introduzimos as definições de propagador do glúon na rede e como se fixa o calibre numericamente. Apresentamos algumas justificativas e limitações sobre a possibilidade da extensão das conclusões baseadas em nossos resultados em YM_3^2 na explicação dos fenômenos físicos. Revisa-se o estado da arte dos cálculos numéricos do propagador do glúon.

As técnicas de simulação são introduzidas no terceiro capítulo e algoritmos mais específicos à área de teorias de calibre na rede são detalhados [21, 22], bem como a paralelização de algoritmos via troca de mensagens, padrão MPI [35]. Não assumimos conhecimento prévio do leitor em matérias de Monte Carlo ou programação paralela e apresentamos os conceitos básicos de forma concisa. Nem de longe esgota o tema [36–40]; serve como uma introdução curta e correta aos problemas numéricos enfrentados nesta tese, podendo ser também uma referência rápida aos métodos. Detalhes do hardware utilizado (pilha de pc's) são apresentados.

Os resultados das simulações são mostrados no capítulo 4, sendo evidente o efeito do volume finito sobre a forma do propagador do glúon. Utilizando a técnica de colapso de dados [41] comparamos os resultados para diferentes espaçamentos da rede. Obtemos um valor de $p_{dec} = 350_{-50}^{+100}$ MeV abaixo do qual o propagador do glúon começa a decrescer. Como as redes são grandes, temos pontos suficientes na região infravermelha para estimar o valor do expoente crítico do propagador, κ , usando generalizações de formas funcionais conhecidas: obtemos $\kappa \sim 0.6$ em acordo com recentes previsões analíticas [42]. Investigação da função de Schwinger (transformada parcial de Fourier do propagador) também está em excelente acordo com os últimos resultados apresentados em [43]. A performance computacional do programa paralelizado é descrita em detalhes [44]. As conclusões e perspectivas de pesquisa são então apresentadas.

No Apêndice A definimos a notação através da dedução da ação de Yang-Mills utilizando a motivação geométrica. Detalhes de contas, “à la Greiner”, são deixados para o Apêndice B. No Apêndice C detalhamos uma simulação serial do oscilador harmônico quântico.

Capítulo 1

De modelos de spins a teorias de calibre na rede

1.1 Introdução

Existe uma grande semelhança entre modelos de spins e teorias de campos formuladas em rede euclidiana [45]. O fato básico é que o peso de Feynman na integral funcional, quando expresso no espaço euclidiano, é dado por $e^{-S/\hbar}$, ou seja, adquire a mesma forma do peso de Boltzmann da mecânica estatística. Depois da continuação analítica do espaço de Minkowski para o de Euclides e da discretização, *podemos interpretar uma teoria de campos na rede como um modelo da mecânica estatística clássica* em quatro dimensões e utilizar os conceitos e técnicas desenvolvidas nesta área. É interessante enfatizar a possibilidade de que a uma teoria de campos discretizada corresponda um sistema físico real, em nada relacionado com a interação original que se queria descrever (*e.g.*, não é relativístico). Por exemplo, a teoria de calibre na rede $U(1)$ em $2 + 1$ dimensões serve de modelo para supercondutores de alta temperatura [46] e o limite de acoplamento forte da QCD em três dimensões e duas cores na rede corresponde ao modelo de Heisenberg [47, 48]. Isto é extremamente instigante se percebermos que uma medida experimental no estado sólido pode nos esclarecer sobre a validade de uma abordagem em Física de altas energias.

É a intenção deste capítulo introduzir o conceito de rede em teorias quânticas de campos; para isso começamos com os modelos de spins mais simples e comentamos a respeito de suas principais características, como a possível manifestação de comportamento crítico. Todos estes modelos tem simetrias globais, mas interessa-nos mais em física de partículas as invariâncias frente a transformações locais. Por isso o passo seguinte é a apresentação do trabalho de Wegner de 1971, no qual é introduzida uma simetria local $Z(2)$ no modelo de Ising. Tendo fixados os conceitos no lado da mecânica estatística, vamos à teoria de campos de calibre e aprendemos como discretizá-la em uma rede euclidiana sem perder a invariância de calibre. Alguns observáveis importantes e o limite do contínuo são discutidos. Por fim, para fixar os conceitos apresentados no capítulo, expomos detalhadamente o cálculo exato na rede da teoria Yang-Mills $SU(2)$ em $1 + 1$ dimensões (YM_2^2) com condições de contorno livres.

1.2 Modelos de spins e Invariância de Calibre

Os modelos de spins são amplamente estudados no estado sólido, principalmente na modelagem do magnetismo; de fato, a idéia mais intuitiva sobre a origem da magnetização em um material é a do alinhamento num mesmo sentido dos dipolos magnéticos existente nos átomos. Em mecânica estatística estes modelos são de extrema importância no estudo de transições de fase, em especial as que envolvem algum tipo de comportamento crítico. O primeiro e mais simples modelo de spins é o *modelo de Ising* [49], inventado em 1920 por Wilhelm Lenz [50] para ser uma versão simplificada de um ferromagneto; seu estudante Ernst Ising tomou o problema como sua tese de doutorado e o resolveu exatamente em uma dimensão [51, 52], apontando a inexistência de magnetização espontânea para temperatura diferente de zero. O interesse neste modelo aparece de fato em duas dimensões [53], onde comportamento crítico é identificado em vários de seus observáveis, inclusive com aparecimento de magnetização espontânea; como bônus a essa riqueza física, matematicamente o modelo de Ising em duas dimensões (sem campo externo) continua sendo exatamente solúvel (Onsager, 1944 [54]). Assim, todo tipo de aproximação feita para descrever os fenômenos críticos deste modelo pode ser comparada ao resultado exato, daí o grande interesse que desperta em físicos de todas as áreas.

Nos modelos de spins analisados nesta seção, consideramos uma rede bidimensional de pontos (*sítios*) identificados por um vetor de dois números inteiros,

$$\vec{n} = (n_1, n_2); \quad (1.1)$$

aos sítios associamos *variáveis de spin*. Seguindo o procedimento padrão da mecânica estatística, devemos tentar calcular a função partição do ensemble canônico

$$Z = \sum_{\text{configs}} e^{-H/kT}, \quad (1.2)$$

onde o somatório é sobre todas as configurações possíveis das variáveis de spin na rede de sítios (todas para baixo, todas pra cima, metade-metade, etc). A partir de Z calculamos as demais grandezas termodinâmicas usando a expressão da *energia livre*

$$F = -kT \log Z \quad (1.3)$$

do sistema.

1.2.1 Modelo de Ising e Fenômenos Críticos

No modelo de Ising em duas dimensões o Hamiltoniano é dado por

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{\vec{n}} s(\vec{n}) \left[\sum_{\mu=1}^{d=2} (s(\vec{n} + \hat{\mu}) + s(\vec{n} - \hat{\mu})) \right] - B \sum_{\vec{n}} s(\vec{n}), \quad (1.4)$$

onde $s(\vec{n}) = \pm 1$, B é um campo magnético externo e J é uma constante de acoplamento positiva, a qual favorece o alinhamento dos spins; assim, o modelo é adequado para a

descrição de ferromagnetos. A interação é apenas entre primeiros vizinhos: a direção do versor $\hat{1}$ é horizontal e de $\hat{2}$, vertical. Com o Hamiltoniano definido temos, em princípio, a função partição em mãos e podemos calcular os observáveis termodinâmicos.

Por exemplo, a magnetização, microscopicamente definida para uma dada configuração de N spins como

$$M([s(\vec{n})]) \equiv \sum_{\vec{n}} s(\vec{n}) , \quad (1.5)$$

no limite termodinâmico ($N \rightarrow \infty$) tem seu valor esperado dado por

$$M(B, T) \equiv \langle M([s(\vec{n})]) \rangle \equiv \frac{1}{Z} \sum_{configs} M([s(\vec{n})]) e^{-H/kT} , \quad (1.6)$$

identidade que pode ser reexpressa como

$$M(B, T) = - \left(\frac{\partial F}{\partial B} \right)_T . \quad (1.7)$$

Por sua vez, a *magnetização por sítio* é dada por

$$m(B, T) = \frac{M(B, T)}{N} . \quad (1.8)$$

Definimos também para cada configuração a *susceptibilidade isotérmica*

$$\chi_T([s(\vec{n})]) = \beta [(M([s(\vec{n})]) - M(B, T))^2] , \quad (1.9)$$

que no limite termodinâmico é expressa através de

$$\chi_T(B, T) = - \left(\frac{\partial^2 F}{\partial B^2} \right)_T = \left(\frac{\partial M}{\partial B} \right)_T . \quad (1.10)$$

Fica claro de (1.9) que a susceptibilidade é uma *medida da flutuação da magnetização* do sistema. Da mesma forma, o *calor específico* é obtido com

$$C_M = -T \left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right)_M = k\beta^2 (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (1.11)$$

e expressa a *flutuação de energia* do sistema como resposta a uma mudança na temperatura.

Uma medida muito importante da interdependência dos spins é a *função de correlação*

$$G_c(\vec{n}, \vec{n}') \equiv \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2 F}{\partial \tilde{B}(\vec{n}) \partial \tilde{B}(\vec{n}')} \Big|_{\tilde{B}=0} = \langle s(\vec{n}) s(\vec{n}') \rangle - \langle s(\vec{n}) \rangle \langle s(\vec{n}') \rangle , \quad (1.12)$$

onde os $\tilde{B}(\vec{n})$ são campos externos fictícios. Ainda pode ser reescrita como

$$G_c(\vec{n}, \vec{n}') = \langle (s(\vec{n}) - \langle s(\vec{n}) \rangle) (s(\vec{n}') - \langle s(\vec{n}') \rangle) \rangle . \quad (1.13)$$

Se as variáveis $s(\vec{n})$ e $s(\vec{n}')$ fossem completamente independentes teríamos os dois termos do lado direito da expressão (1.12) iguais e, portanto, uma função de correlação nula. Isto,

ou corresponderia a uma teoria em que não existe interação entre as variáveis de spin, o que não é o caso, ou a uma agitação térmica muito elevada.

De fato, como a interação é apenas entre primeiros vizinhos, a correlação entre dois spins decai com a distância entre eles (ver cap. 8 da referência [55]):

$$G(\vec{n}, \vec{n} + \vec{x}) \propto x^{-\tau} e^{-x/\xi}, \quad (1.14)$$

onde ξ é o *comprimento de correlação*, conceito chave no entendimento dos fenômenos críticos.

Como pode ser verificado, o Hamiltoniano de Ising sem campo externo é invariante frente a transformações do grupo $Z(2)$:

$$s(\vec{n}) \rightarrow e^{im\pi} s(\vec{n}) = \pm s(\vec{n}) \quad (m = 0, 1), \quad (1.15)$$

ou, em termos menos matemáticos, ele não muda após a inversão de todos os spins. É uma simetria global, já que o elemento do grupo $Z(2)$ que produz a transformação é o mesmo em todos os pontos da rede. Esta simetria é quebrada explicitamente se recolocarmos o termo de campo externo, pois este favorece estados com spin positivo ($B > 0$).

Em um sistema Ising no qual B fosse sendo gradativamente diminuído até seu completo desligamento ainda haveria magnetização se o sistema estiver abaixo de uma dada *temperatura crítica* (temperatura de Curie). Isto parece um contrasenso já que o Hamiltoniano sem o termo de campo externo B não dá preferência a nenhuma direção para os spins, ao passo que a magnetização é a própria expressão de uma direção privilegiada. Ao fato de que o estado do sistema não possui uma simetria que o Hamiltoniano exhibe se dá o nome de *quebra espontânea de simetria*, no caso, simetria especular. A quantidade que serve de indicador da passagem da fase com simetria quebrada para a fase com simetria preservada chama-se *parâmetro de ordem*; no caso do modelo de Ising, este é a magnetização.

Próximas à temperatura crítica algumas grandezas do sistema se anulam ou divergem seguindo *leis de potências*: a magnetização vai se anulando para $T < T_c$ de acordo com

$$M(0, T) \propto (T_c - T)^\beta, \quad (1.16)$$

já o calor específico, a susceptibilidade e o comprimento de correlação divergem como

$$C_M \propto (T - T_c)^{-\alpha}, \quad (1.17)$$

$$\chi_T \propto |T - T_c|^{-\gamma}, \quad (1.18)$$

$$\xi \propto (T - T_c)^{-\nu}, \quad (1.19)$$

respectivamente. No modelo de Ising em duas dimensões os valores desses *expoentes críticos* são $\alpha = 0^1$, $\beta = 1/8$, $\gamma = 7/4$ e $\nu = 1$. Este tipo de comportamento é característico dos *fenômenos críticos* [55, 56]: a divergência do comprimento de correlação indica a perda da escala de comprimento do sistema (*hipótese de escalamento*), de modo que os detalhes finos da interação não interessam muito na descrição dos fenômenos. De fato, sistemas físicos muito diferentes podem apresentar o mesmo comportamento crítico, ou seja, ter os mesmos

¹ Divergência logarítmica.

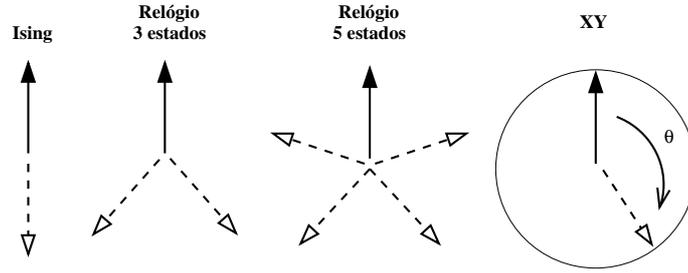


Fig. 1.1: Do modelo de Ising ao modelo XY

expoentes críticos; sistemas assim pertencem a uma mesma *classe de universalidade*. Argumentos referentes à dimensionalidade do sistema, número de componentes do parâmetro de ordem e simetrias, servem para discriminar as diferentes classes [57]. Na seção 1.3.5, ao discutirmos o limite do contínuo das teorias de calibre na rede, ficará clara a importância destas considerações sobre criticalidade.

1.2.2 Modelo Relógio e XY

Uma extensão natural do modelo de Ising é o *modelo relógio* [58, 59] de N estados, uma generalização do *modelo de Potts* [60]. O Hamiltoniano é similar a (1.4),

$$H = -\frac{J}{4} \sum_{\vec{n}} [s(\vec{n})c^*(\vec{n}) + s^*(\vec{n})c(\vec{n})] - \frac{B}{2} \sum_{\vec{n}} [s(\vec{n}) + s^*(\vec{n})] , \quad (1.20)$$

$$c(\vec{n}) = \sum_{\mu=1}^{d=2} [s(\vec{n} + \hat{\mu}) + s(\vec{n} - \hat{\mu})] , \quad (1.21)$$

mas as variáveis de spin assumem os valores da N -ésima raiz da unidade

$$s(\vec{n}) = e^{i\frac{2\pi}{N}l}, \quad l = 0, 1, 2, \dots, N-1 ; \quad (1.22)$$

$s^*(\vec{n})$ denota o complexo conjugado de $s(\vec{n})$. O modelo possui claramente simetria global $Z(N)$ para campo externo nulo. Para $N = 2$ recupera-se o modelo de Ising.

Para um valor muito grande de N no modelo relógio o ângulo que define a variável de spin, $\theta = 2\pi l/N$, é quase contínua. Isto motiva mais uma extensão desses modelos onde cada variável de spin pode estar alinhada num ângulo $\theta \in [0, 2\pi)$. É o chamado modelo XY (rotor-plano), com mesmo Hamiltoniano de (1.20), mas com

$$s(\vec{n}) = e^{i\theta_{\vec{n}}}, \quad \theta_{\vec{n}} \in [0, 2\pi) . \quad (1.23)$$

O modelo XY é invariante frente a transformações globais do grupo $U(1)$,

$$s(\vec{n}) \rightarrow e^{i\theta'} s(\vec{n}) , \quad (1.24)$$

e apresenta transição de fase do tipo Kosterlitz-Thouless [61]. Esta evolução conceitual do modelo de Ising ao modelo XY é representada na figura 1.1.

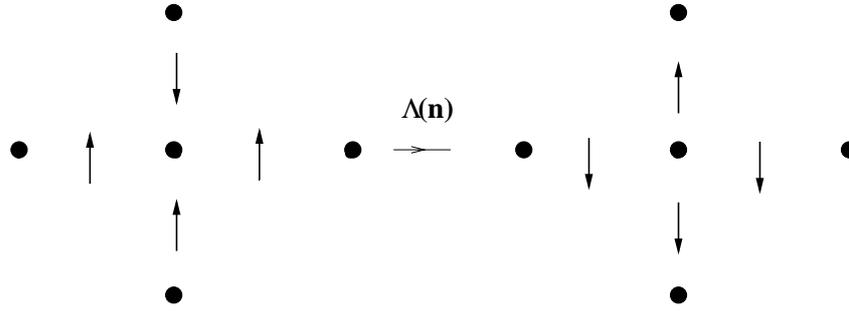


Fig. 1.2: Transformação de calibre local num modelo de spins.

1.2.3 Modelos de spins com invariância de calibre local

Introduzimos agora modelos de spins, onde as variáveis de spins não estão localizadas nos sítios da rede, mas sim entre estes. Denotamos a variável de spin associada à ligação entre os pontos \vec{n} e $\vec{n} + \hat{\mu}$ por $s_{\mu}(\vec{n})$, podendo esta variável assumir os valores $+1$ ou -1 . Uma transformação de calibre local $\Lambda(\vec{n})$ atua sobre os spins primeiro-vizinhos situados em torno do ponto \vec{n} , podendo manter ($\Lambda(\vec{n}) = 1$) ou inverter ($\Lambda(\vec{n}) = -1$) seu alinhamento (ver figura 1.2 para o caso da inversão). Percebe-se que o produto das variáveis de spin ao longo de um *caminho fechado* nesta rede será invariante frente a $\Lambda(\vec{n})$: sempre um número par de spins ($0, 2, \dots$) estará invertido, o que não muda o produto. Com isto em mente, pode-se construir o Hamiltoniano mais simples que contenha invariância de calibre local $Z(2)$ usando os menores caminhos fechados na rede: as *plaquetas* (figura 1.3). Temos assim:

$$H = -J \sum_{\vec{n}} \sum_{1 \leq \mu < \nu \leq 2} s_{\mu}(\vec{n}) s_{\nu}(\vec{n} + \hat{\mu}) s_{-\mu}(\vec{n} + \hat{\mu} + \hat{\nu}) s_{-\nu}(\vec{n} + \hat{\nu}), \quad (1.25)$$

onde $s_{-\mu}(\vec{n}) = s_{\mu}(\vec{n} - \hat{\mu}) = \pm 1$. Este modelo foi inventado em 1971 por F. Wegner [62].

Da mesma forma que evoluímos na seção anterior do modelo de Ising com invariância global $Z(2)$ para o modelo XY com invariância global $U(1)$, podemos agora construir um modelo com invariância de calibre local $U(1)$ para o modelo XY usando as plaquetas introduzidas acima; as variáveis de spin são dadas por

$$s_{\mu}(\vec{n}) = e^{i\alpha_{\mu}(\vec{n})}, \quad (1.26)$$

com $s_{-\mu}(\vec{n}) = s_{\mu}^*(\vec{n} - \hat{\mu})$, e o Hamiltoniano, em analogia com (1.25), dado por

$$H = -J \sum_{\vec{n}} \sum_{1 \leq \mu < \nu \leq 2} s_{\mu}(\vec{n}) s_{\nu}(\vec{n} + \hat{\mu}) s_{\mu}^*(\vec{n} + \hat{\nu}) s_{\nu}^*(\vec{n}). \quad (1.27)$$

É claro que a plaqueta é invariante frente a transformações de calibre do tipo

$$s_{\mu}(\vec{n}) \rightarrow \Lambda(\vec{n}) s_{\mu}(\vec{n}) \Lambda^{-1}(\vec{n} + \hat{\mu}), \quad (1.28)$$

onde

$$\Lambda(\vec{n}) = e^{i\theta'(\vec{n})}, \quad (1.29)$$

com $\Lambda^{-1}(\vec{n}) = \Lambda^*(\vec{n})$. Assim, este é um modelo com invariância de calibre local $U(1)$, um grupo contínuo como os encontrados em altas energias.

Veremos como o conceito de plaqueta ajuda na formulação de teorias de campos discretizadas com invariância de calibre local.

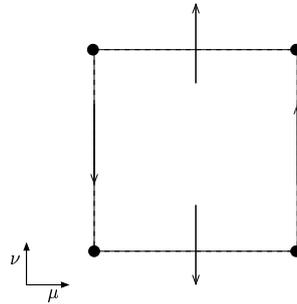


Fig. 1.3: *Plaquetas.*

1.3 Teorias de campos de calibre na rede

As teorias de calibre (ver Apêndice A) são a base do atual modelo padrão, sendo usadas na descrição tanto das interações eletro-fracas quanto das interações fortes² [2, 65]. Um passo importante na aceitação deste tipo de teoria foi a demonstração de sua renormalizabilidade feita por 't Hooft e Veltman [66] no contexto da teoria de perturbação usando regularização dimensional.

No entanto, boa parte da riqueza destas teorias situa-se em um regime no qual os tradicionais métodos de perturbação não podem ser aplicados; como as técnicas de regularização da teoria estão estreitamente ligadas a este tipo de abordagem é necessário introduzir um novo modo de exibição das divergências da teoria quântica sem apelar para a perturbação em campos fracos.

Em 1974, Kenneth G. Wilson [19] introduziu uma regularização não-perturbativa baseada na discretização do espaço-tempo e obteve uma forte indicação de que os quarks são confinados na QCD. Em pouco tempo esta regularização foi formalizada e estendida para outras teorias quânticas de campos [22–25]. Nesta seção introduzimos o formalismo da rede e como as teorias de calibre encaixam-se nele.

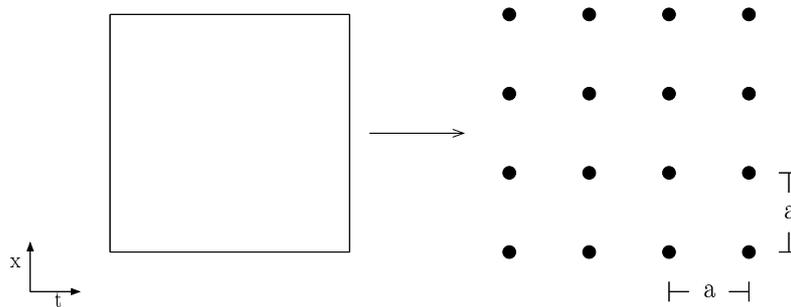


Fig. 1.4: *A rede.*

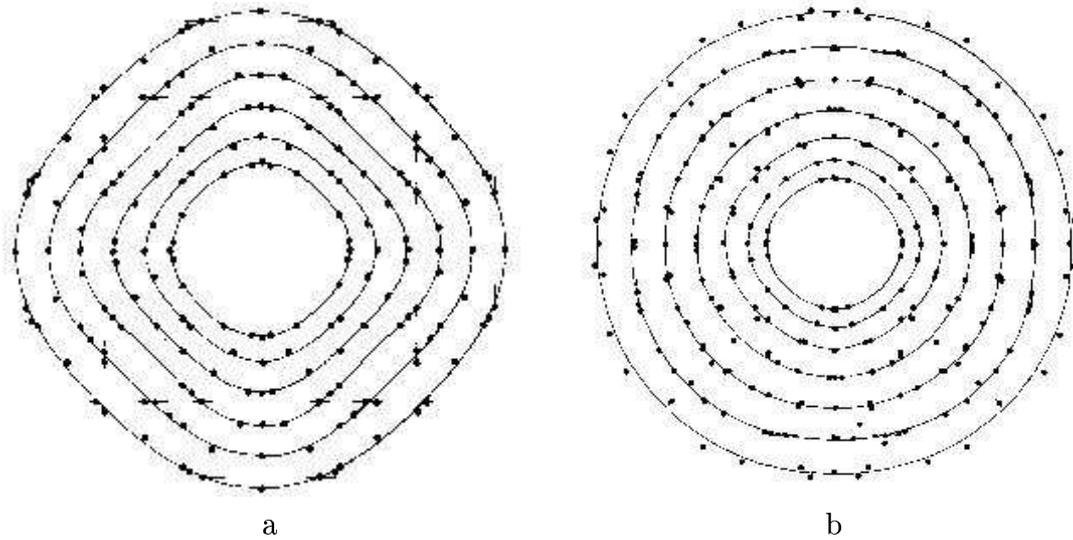


Fig. 1.5: Restauração da invariância rotacional de (a) $\beta=2$, 8×4 para (b) $\beta = 2.25$, 16×6 [67].

1.3.1 A rede

A idéia da rede é bastante ousada, pois a primeira consequência da discretização do espaço-tempo é a quebra da invariância de Poincaré. Na figura 1.4 mostramos a discretização num plano; fica claro, por exemplo, que a simetria de rotação não é mais válida, já que a mesma configuração do espaço-tempo só volta a se repetir após um giro de $\pi/2$. A invariância $O(4)$ é perdida e o correto comportamento só é retomado no limite do contínuo no qual o parâmetro da rede, a , vai a zero.

No entanto, a retomada desta invariância parece ocorrer para valores de a não tão pequenos [67, 68]: $\beta \geq 2.2$ para $SU(2)$ e $\beta \geq 5.5$ para $SU(3)$. Estes resultados baseiam-se na revalidação da relação de dispersão no contínuo, $E^2 = p^2 + m^2$ (ver figura 1.5), em redes 2D.

1.3.2 Elos e Plaquetas

Apesar de se ter quebrado a invariância de Poincaré, pode-se tentar salvar a invariância de calibre que a teoria possui no contínuo. A discussão sobre modelos de spin na seção anterior sugere que construamos “variáveis de spin” que sob uma transformação de calibre se comportem como em (1.28) para que possamos escrever quantidades invariantes a partir das plaquetas.

De fato, na QED existe uma quantidade chamada *integral de linha de Schwinger*, definida

² De fato, na formulação por *vierbeins* (tétrades) a relatividade geral é considerada uma teoria de calibre [63, 64].

por³

$$U_\mu(x, y) = e^{ig \int_x^y A_{(\mu)}(z) dz_{(\mu)}}, \quad (1.30)$$

a qual, sob uma transformação de calibre do grupo $U(1)$

$$A_\mu(x) \rightarrow A_\mu(x) - \partial_\mu \alpha(x) \quad (1.31)$$

se comporta como

$$U_\mu(x, y) \rightarrow \Omega(x) U_\mu(x, y) \Omega^{-1}(y), \quad (1.32)$$

onde

$$\Omega(x) = e^{i\alpha(x)}. \quad (1.33)$$

Comparando a expressão acima com (1.28) vemos que $U_\mu(x, y)$ tem o comportamento procurado. Para pontos x e y muito próximos ($y = x + a$) temos:

$$U_\mu(x) \sim e^{igaA_\mu(x)}. \quad (1.34)$$

Esta analogia sugere que definamos os *elos*⁴ (as novas variáveis de spin) de nossa rede de espaço-tempo como sendo

$$U_\mu(x) \equiv e^{igaA_\mu(x)}; \quad (1.35)$$

esta definição nos leva a

$$U_\mu^{-1}(x) = U_\mu^*(x). \quad (1.36)$$

Construimos as plaquetas da forma

$$P_{\mu\nu}(x) = U_\mu(x) U_\nu(x + \hat{\mu}) U_\mu^*(x + \hat{\nu}) U_\nu^*(x). \quad (1.37)$$

A figura 1.6 ilustra estes conceitos de elos e plaquetas em grupos de calibre $U(1)$ em uma rede quadrada bidimensional.

A breve exposição da teoria de Yang-Mills apresentada no Apêndice A valida expressões similares a (1.35) e (1.37) para o caso de $SU(N)$, considerando, é claro, que agora estas quantidades estão no espaço de cor e devemos utilizar o hermitiano conjugado:

$$U_\mu(x) \equiv e^{-aA_\mu(x)} = e^{iga \sum_b A_\mu^b(x) T^b}, \quad (1.38)$$

$$P_{\mu\nu}(x) = U_\mu(x) U_\nu(x + \hat{\mu}) U_\mu^\dagger(x + \hat{\nu}) U_\nu^\dagger(x), \quad (1.39)$$

com T^b sendo os $N^2 - 1$ geradores da álgebra $\mathfrak{su}(N)$.

Reexpressando a plaqueta (1.39) usando a fórmula de Campbell-Baker-Hausdorff,

$$e^x e^y = e^{x+y+(1/2)[x,y]+\dots}, \quad (1.40)$$

obtemos

$$P_{\mu\nu}(x) = e^{-a^2 G_{\mu\nu}(x)}, \quad (1.41)$$

³ Índices de Lorentz entre parênteses indicam que a convenção de soma de Einstein *não* se aplica.

⁴ *Links*.

onde

$$G_{\mu\nu}(x) = F_{\mu\nu}(x) + \mathcal{O}(a) \quad (1.42)$$

$$F_{\mu\nu}(x) = \Delta_\mu A_\nu(x) - \Delta_\nu A_\mu(x) + [A_\mu(x), A_\nu(x)] \quad (1.43)$$

$$\Delta_\mu A_\nu(x) = (A_\nu(x + \hat{\mu}) - A_\nu(x))/a . \quad (1.44)$$

Ou seja,

$$P_{\mu\nu}(x) = 1 - a^2 G_{\mu\nu}(x) + \frac{a^4}{2} G_{(\mu)(\nu)}(x) G_{(\mu)(\nu)}(x) + \mathcal{O}(a^6) . \quad (1.45)$$

Como para as teorias de calibre no contínuo interessa apenas o terceiro termo da expansão acima, usamos a combinação

$$\begin{aligned} 1 - \frac{1}{2}(P_{\mu\nu}(x) + P_{\mu\nu}^\dagger(x)) &= \frac{1}{2} a^4 G_{(\mu)(\nu)}(x) G_{(\mu)(\nu)}(x) + \mathcal{O}(a^8) , \\ &= \frac{1}{2} a^4 F_{(\mu)(\nu)}(x) F_{(\mu)(\nu)}(x) + \mathcal{O}(a^6) . \end{aligned} \quad (1.46)$$

Em termos de componentes de cor a equação (1.43) fica

$$F_{\mu\nu}^a(x) = \Delta_\mu A_\nu^a(x) - \Delta_\nu A_\mu^a(x) + g f^{abc} A_\mu^b(x) A_\nu^c(x) , \quad (1.47)$$

onde usamos $[T^a, T^b] = i f^{abc} T^c$ e $\text{Tr}[T^a T^b] = \delta^{ab}/2$.

1.3.3 Ação de Wilson e ação melhorada

A partir da expressão (1.46) monta-se a mais simples ação discretizada para uma teoria de calibre,

$$S_W[U_\mu(x)] = \beta \sum_x \sum_{1 \leq \mu < \nu \leq d} \left[1 - \frac{1}{2N} \text{Tr}(P_{\mu\nu}(x) + P_{\mu\nu}^\dagger(x)) \right] , \quad (1.48)$$

conhecida por *ação de Wilson*. A constante adimensional β deve valer

$$\beta = \frac{2N}{g^2 a^{4-d}} \quad (1.49)$$

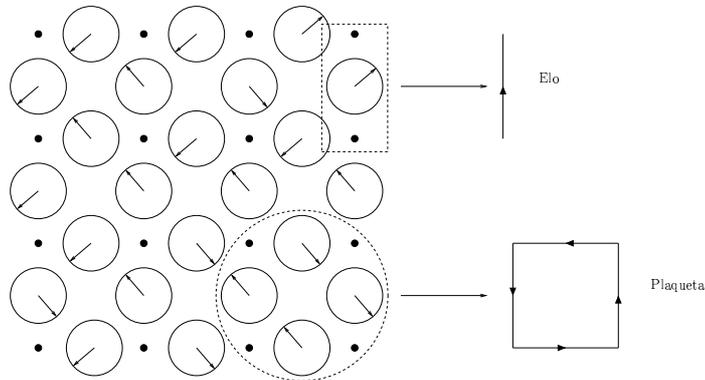
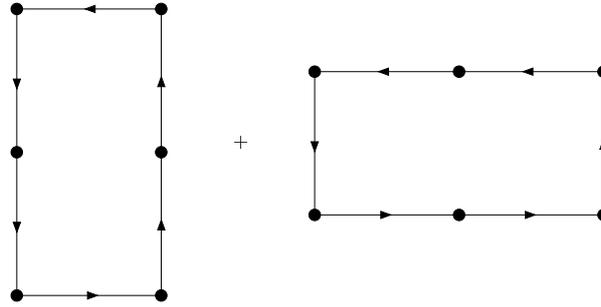


Fig. 1.6: Rede de elos e plaquetas para o grupo $U(1)$.


Fig. 1.7: *Retângulo.*

para reproduzir o limite do contínuo da Yang-Mills $SU(N)$ (equação (A.50) do Apêndice A). No caso de $U(1)$ (grupo de calibre da QED), teríamos a mesma ação de Wilson, mas sem o traço e com $N = 1$; para este caso $\beta = 1/(g^2 a^{4-d})$.

Devido à semelhança formal de β com o onipresente termo $1/kT$ da mecânica estatística, podemos logo dizer que uma expansão para acoplamento forte (g grande) é equivalente a uma expansão a altas temperaturas na mecânica estatística.

A ação de Wilson possui erros de $\mathcal{O}(a^2)$, pois usa apenas plaquetas em sua definição. Podemos melhorar a discretização adicionando outros termos à ação: por exemplo, a ação de Lüscher e Weisz [69] considera plaquetas e retângulos diminuindo o erro para $\mathcal{O}(a^4)$:

$$S_{LW} = \frac{5\beta}{3N} \sum_{pl} Tr \left\{ 1 - \frac{1}{2}(P_{\mu\nu} + P_{\mu\nu}^\dagger) \right\} - \frac{\beta}{12N} \sum_{ret} Tr \left\{ 1 - \frac{1}{2}(R_{\mu\nu} + R_{\mu\nu}^\dagger) \right\}, \quad (1.50)$$

onde $P_{\mu\nu}(x)$ é dado por (1.37) e

$$\begin{aligned} R_{\mu\nu}(x) = & U_\mu(x)U_\nu(x + \hat{\mu})U_\nu(x + \hat{\nu} + \hat{\mu})U_\mu^\dagger(x + 2\hat{\nu})U_\nu^\dagger(x + \hat{\nu})U_\nu^\dagger(x) \\ & + U_\mu(x)U_\mu(x + \hat{\mu})U_\nu(x + 2\hat{\mu})U_\mu^\dagger(x + \hat{\mu} + \hat{\nu})U_\nu^\dagger(x + \hat{\nu})U_\nu^\dagger(x), \end{aligned} \quad (1.51)$$

representado em termo de elos na figura 1.7. A ação (1.50) é um exemplo das chamadas *ações melhoradas* que são mais eficientes na busca do limite contínuo. Nesta tese, será *apenas utilizada a ação de Wilson*, pois, como será explicado no capítulo 3, é mais leve para cálculos em paralelo.

1.3.4 Observáveis

Em analogia com o contínuo, podemos obter valores esperados de observáveis utilizando o formalismo de integral funcional. Nesta formulação, o observável é avaliado sobre todas as possíveis configurações dos campos de calibre distribuídas de acordo com o peso de Feynman:

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}[A_\mu] O([A_\mu]) e^{-S([A_\mu])}. \quad (1.52)$$

A integral funcional acima tem significado formal e, de fato, não está bem definida matematicamente no contínuo minkowskiano [70].

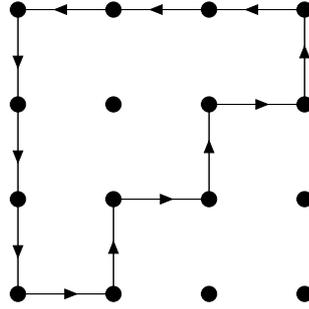


Fig. 1.8: Volta de Wilson.

Na rede isto não ocorre: o valor esperado de um observável é expresso por

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int \prod_{x,\mu} dU_\mu(x) O([U_\mu(x)]) e^{-S_W([U_\mu(x)])}, \quad (1.53)$$

onde x pertence à rede euclidiana *denumerável*, ou seja, está perfeitamente definida. Na fórmula acima

$$Z = \int \prod_{x,\mu} dU_\mu(x) e^{-S_W([U_\mu(x)])}, \quad (1.54)$$

$dU_\mu(x)$ sendo a *medida invariante de Haar* (ver seção 2.2 de [71]) do grupo de calibre da teoria. Esta medida possui, como no contínuo, as seguintes propriedades:

- Invariância à esquerda e à direita:

$$\int_G f(U) dU = \int_G f(VU) dU = \int_G f(UV) dU, \quad \forall V \in G \quad (1.55)$$

- Normalização:

$$\int_G dU = 1 \quad (1.56)$$

Restringimo-nos nesta tese a Yang-Mills pura, os observáveis de interesse sendo funções invariantes de calibre dos elos⁵. Uma das mais básicas quantidades é a chamada *volta de Wilson*⁶ ou ainda *volta de Wilson-Wegner*; é o valor esperado do produto dos elos em um caminho fechado:

$$W(\mathcal{C}) \equiv \langle \text{Tr} \left(\prod_{U \in \mathcal{C}} U_\mu(x) \right) \rangle. \quad (1.57)$$

A volta de Wilson, ilustrada na figura 1.8, é invariante frente a transformações de calibre.

⁵ De fato, como veremos no próximo capítulo, valores esperados contendo férmions podem ser calculados em Yang-Mills pura na aproximação por apagamento (*quenched*). Observáveis deste tipo devem ser, é claro, funções invariantes de calibre das variáveis fermiônicas e dos elos.

⁶ *Wilson loop*.

Podemos definir várias quantidades usando a volta de Wilson, por exemplo, o *potencial estático entre quarks* (ver capítulo 7 da referência [21])

$$V(R) \equiv - \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \log(W(\mathcal{C}_{R,T})) . \quad (1.58)$$

A volta $W(\mathcal{C}_{R,T})$ corresponde a um retângulo de lados R e T : fisicamente, colocamos dois quarks infinitamente pesados num lado do retângulo e deixamo-los evoluir no tempo. A partir do potencial estático define-se a *tensão da corda*

$$\sigma \equiv \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{V(R)}{R} ; \quad (1.59)$$

é claro que se σ for constante o potencial estático cresce linearmente com a separação entre os quarks sugerindo um cenário de confinamento. De fato, fala-se em *confinamento estático dos quarks* quando uma extensa volta de Wilson tem o seguinte comportamento

$$\lim_{R,T \rightarrow \infty} W(\mathcal{C}_{R,T}) \propto e^{-\sigma RT}; \quad (1.60)$$

a expressão acima é conhecida como *lei da área* da volta de Wilson e foi a indicação obtida por Wilson em 1974, no regime de acoplamento forte, de que os quarks estão confinados.

1.3.5 Limite do Contínuo

Elaborou-se portanto uma ação discretizada que se aproxima do limite do contínuo simples, com pequena correções da ordem de a^2 . No entanto, vimos que outras ações, como a de Lüscher-Weisz, também reproduzem este limite. Como saber se de fato as mais diferentes ações que para $a = 0$ reproduzem o limite contínuo simples, são fisicamente satisfatórias para $a > 0$?

A primeira observação feita neste capítulo foi sobre a semelhança entre a teoria quântica de campos euclidiana e a mecânica estatística; no espaço de Euclides o gerador funcional Z , expressão (1.54), é formalmente equivalente a uma função partição. De fato, vamos precisar desta analogia para mostrar que a ação discretizada precisa de um ponto crítico no seu espaço de parâmetros para reproduzir *alguma* teoria quântica de campos no contínuo.

Quando estamos interessados no espectro de uma teoria quântica de campos euclidiana investigamos o decaimento da função de Schwinger⁷ para tempos grandes, a momentum zero:

$$C(t) \equiv \langle \phi^\dagger(t)\phi(0) \rangle = \sum_n |\langle vac|\phi|n \rangle|^2 \exp\{-E_n t\} \\ \xrightarrow{t \rightarrow \infty} |\langle vac|\phi|0 \rangle|^2 \exp\{-mt\} , \quad (1.61)$$

onde usamos que a massa é a menor excitação (E_0) da partícula. Definindo a massa adimensional⁸ como $\hat{m} = ma$ a exponencial aparecendo em (1.61) fica

$$C(t) \propto e^{-\hat{m}t} . \quad (1.62)$$

⁷ Transformada parcial de Fourier, $C(t, \vec{p})$.

⁸ Utilizamos a notação do chapéu para denotar quantidades adimensionais.

Quando $a \rightarrow 0$, $\hat{m} \rightarrow 0$, já que m é um valor físico fixo; assim, a cauda da exponencial acima se estende infinitamente.

Do lado da mecânica estatística, a função de correlação entre spins se comporta como em (1.14) próxima ao ponto crítico:

$$G(x) \propto e^{-x/\xi} . \quad (1.63)$$

Ademais, de acordo com (1.19), $\xi \rightarrow \infty$ no ponto crítico, estendendo também a cauda da correlação (1.63).

Considerada a igualdade formal entre (1.2) e (1.54), a semelhança de comportamento entre (1.62) para $a \rightarrow 0$ e (1.63) para $T \rightarrow T_c$ nos leva a conclusão de que o *limite do contínuo é um ponto crítico do modelo da mecânica estatística associado à teoria quântica de campos euclidiana discretizada*. De fato, a menor massa do sistema quântico corresponderá ao maior comprimento de correlação do modelo estatístico equivalente

$$\hat{\xi} = \frac{1}{\hat{m}} . \quad (1.64)$$

Assim, no limite do contínuo o comprimento de correlação em unidades da rede diverge: $\hat{\xi} \rightarrow \infty$.

Da discussão acima podemos afirmar que *se a ação discretizada não possuir um ponto crítico, ela não descreverá uma teoria de campos no contínuo*.

Sendo o limite do contínuo um fenômeno crítico, precisamos sintonizar os parâmetros da ação discretizada de acordo com sua proximidade do ponto crítico, em nosso caso, $a = 0$.

Na ação de Wilson (1.48), o único parâmetro existente é a constante g presente em β , a qual, pelo argumento acima é uma função de a . Chamamos g^* o valor desta constante no ponto crítico, ou seja,

$$\lim_{a \rightarrow 0} g(a) = g^* ; \quad (1.65)$$

equivalentemente podemos definir β^* como

$$\lim_{a \rightarrow 0} \beta(a) = \beta^* . \quad (1.66)$$

Abaixo argumentaremos porque os valores críticos destas quantidades em teorias de calibre na rede serão $g^* = 0$ e $\beta^* = \infty$ (apesar de não haver certeza de que estes sejam os únicos valores críticos). Trabalharemos mais em cima do valor crítico de β por ser esta uma quantidade adimensional por definição.

Os observáveis seriam também apenas função de β e a ; no entanto, como acabamos de ver, β é função de a ; invertendo⁹ esta obtemos $a(\beta)$, de modo que os observáveis serão realmente apenas dependentes de β ¹⁰. Suponhamos um observável \mathcal{O} de dimensão de massa igual a $d_{\mathcal{O}}$. Temos que

$$\mathcal{O}(\beta) = \frac{1}{a^{d_{\mathcal{O}}}} \hat{\mathcal{O}}(\beta) \quad (1.67)$$

⁹ Supomos que $\beta(a)$ seja uma função invertível para a suficientemente pequeno.

¹⁰ Em toda esta sub-seção estamos trabalhando na hipótese de volume infinito. É claro que em simulações este limite nunca é alcançado e estudos de efeitos de volume finito são uma área em si. Na verdade esta tese se baseia fundamentalmente na dramática mudança do comportamento do propagador do glúon no infravermelho enquanto aumentamos o volume da rede, para o mesmo β .

assume um valor finito quando $\beta \rightarrow \beta^*$, o qual será igual ao valor físico do observável se $\beta(a)$ (ou equivalentemente $a(\beta)$) for ajustado adequadamente

$$\mathcal{O}_{\text{físico}} = \lim_{\beta \rightarrow \beta^*} \mathcal{O}(\beta) . \quad (1.68)$$

Nem sempre sabemos $a(\beta)$; nestes casos podemos alternativamente utilizar (1.67), fixando o lado esquerdo no valor físico do observável e invertendo a relação para obter

$$a(\beta) = \left(\frac{\hat{\mathcal{O}}(\beta)}{\mathcal{O}_{\text{físico}}} \right)^{1/d_{\mathcal{O}}} . \quad (1.69)$$

Para o caso de teorias de calibre do tipo Yang-Mills, devido ao fenômeno da liberdade assintótica podemos calcular $\beta(a)$ diretamente. Em $3 + 1$ dimensões temos que a um loop [72, 73]

$$g^2(a) = -\frac{1}{2\beta_0 \ln(a\Lambda_L)} , \quad (1.70)$$

onde $\beta_0 = 11N/48\pi^2$ e Λ_L é uma constante de integração que revela o aparecimento espontâneo de uma escala de energia durante o processo de renormalização (*transmutação dimensional*). Quando $a \rightarrow 0$, a constante g se anula e portanto descobrimos que

$$\beta^* = +\infty . \quad (1.71)$$

Este mesmo ponto crítico vale para várias teorias, em particular para Yang-Mills em $2 + 1$ dimensões [74, 75].

Em resumo, *o limite do contínuo só é alcançado a partir da ação de Wilson para β suficientemente grande.*

1.4 Modelo exatamente solúvel para $SU(2)$ em $1+1$

Para ilustrar os conceitos apresentados nas seções anteriores vamos resolver exatamente a teoria de calibre $SU(2)$ em uma rede bidimensional (YM_2^2) com \mathcal{N} sítios e condições de contorno livres [76–83]. Começamos a partir da função partição na forma

$$Z_W = \int [dU] \exp(-S_W([U_\mu(x)])) , \quad (1.72)$$

onde S_W é a ação de Wilson e $[dU]$ é a medida de integração. A parte constante da ação não nos interessa, já que esta sempre fatora; portanto definimos

$$S([U_\mu(x)]) \equiv -\frac{\beta}{4} \sum_p S_p(x) , \quad (1.73)$$

onde $\beta = 4/(ag)^2$, como sendo a soma de quantidades associadas às plaquetas individuais

$$S_p(x) = \text{Tr}(P_{01}(x) + P_{01}^\dagger(x)) , \quad (1.74)$$

com

$$P_{01}(x) = U_0(x)U_1(x + \hat{0})U_0^\dagger(x + \hat{1})U_1^\dagger(x) . \quad (1.75)$$

Qualquer observável poderá ser calculado através de

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z_W} \int [dU] O([U_\mu(x)]) e^{-S_W([U_\mu(x)])} = \frac{1}{Z} \int [dU] O([U_\mu(x)]) e^{\frac{\beta}{4} \sum_p S_p} , \quad (1.76)$$

com

$$Z = Z(\beta) = \int [dU] \exp \left[\frac{\beta}{4} \sum_p S_p(x) \right] . \quad (1.77)$$

Utilizaremos o fato de que a ação é invariante frente a transformações de calibre para fazer uma escolha de calibre, ou seja, impor uma equação arbitrária que os campos devem respeitar; como veremos, isto facilita sobremaneira os cálculos. Para esta solução exata é mais adequado o calibre temporal ($A_0 = 0$ no contínuo)

$$U_0(x) = \mathbb{1}, \quad \forall x \in \text{rede} . \quad (1.78)$$

Neste calibre as plaquetas ficam

$$P_{01}(x) = U_1(x + \hat{0})U_1^\dagger(x) , \quad (1.79)$$

ou seja, ao fixarmos os valores dos elos em uma direção *reduzimos o problema 2D para vários 1D*.

Introduzindo na equação acima a seguinte mudança de variáveis

$$U_1(x + \hat{0}) \equiv W(x)U_1(x) \quad (1.80)$$

($W(x)$ é onde os graus de liberdade de $U_1(x + \hat{0})$ foram parar), $Z(\beta)$ fica na forma

$$Z(\beta) = \prod_x \int [dW(x)] \exp \left(\frac{\beta}{4} \sum_x \text{Tr}(W(x) + W^\dagger(x)) \right) \quad (1.81)$$

$$= z(\beta)^{\mathcal{N}} . \quad (1.82)$$

Reduzimos assim o problema ao cálculo de

$$z(\beta) = \int dW \exp \left(\frac{\beta}{4} \sum_x \text{Tr}(W + W^\dagger) \right) . \quad (1.83)$$

Até aqui a análise é facilmente estendida para grupos $U(N)$ e $SU(N)$.

Em nosso caso, $SU(2)$, fazemos a seguinte parametrização dos elementos do grupo:

$$W = w_0 \mathbb{1} + i\vec{\sigma} \cdot \vec{w} \quad (1.84)$$

onde σ são as matrizes de Pauli e

$$w_0 + |\vec{w}|^2 = 1 ; \quad (1.85)$$

a medida de Haar para esta parametrização é dada por

$$dU = \frac{1}{\pi^2} \delta(w_0 + |\vec{w}|^2 - 1) ; \quad (1.86)$$

não é difícil verificar que esta expressão respeita as condições (1.55) e (1.56). Usando as definições acima podemos calcular (1.83), como explicitado em (B.1):

$$z(\beta) = \frac{2I_1(\beta)}{\beta} . \quad (1.87)$$

Podemos usar a mesma abordagem para o cálculo da volta de Wilson desta teoria:

$$W_{\mathcal{C}}(\beta) = \frac{1}{2} \left\langle \text{Tr} \left[\prod_{U \in \mathcal{C}} U_{\mu}(x) \right] \right\rangle , \quad (1.88)$$

onde \mathcal{C} é um caminho na rede. Em particular nos interessa um caminho retangular de tamanho T temporal e R espacial, já que, como mostrado na seção anterior, isto está relacionado à energia de interação de fontes estáticas. Temos que

$$W_{R,T}(\beta) = \frac{1}{2} \left\langle \text{Tr} \left[\left(\prod_{t=0}^{T-1} U_0(t\hat{0}) \right) \left(\prod_{r=0}^{R-1} U_1(T\hat{0} + r\hat{1}) \right) \right. \right. \quad (1.89)$$

$$\left. \left. \times \left(\prod_{t'=T-1}^0 U_0^\dagger(R\hat{1} + t'\hat{0}) \right) \left(\prod_{r'=R-1}^0 U_1^\dagger(r'\hat{1}) \right) \right] \right\rangle . \quad (1.90)$$

Como é uma grandeza invariante de calibre, não precisamos fixar o calibre, mas isto facilita grandemente os cálculos. Optamos por usar o calibre tipo pente¹¹, um misto de calibre temporal com a fixação do valor dos elos numa fatia temporal ($U_1(n\hat{1}) = 1$, ver figura 1.9):

$$W_{R,T}(\beta) = \frac{1}{2} \left\langle \text{Tr} \left[\left(\prod_{r=0}^{R-1} U_1(T\hat{0} + r\hat{1}) \right) \right] \right\rangle . \quad (1.91)$$

Fazendo a mudança de variável

$$U_1(T\hat{0} + k\hat{1}) \equiv W((T-1)\hat{0} + k\hat{1})W((T-2)\hat{0} + k\hat{1})\dots W(k\hat{1}) , \quad (1.92)$$

a volta de Wilson fica dada em termo das variáveis W como

$$W_{R,T}(\beta) = \frac{1}{2Z} \prod_x \int dW(x) \text{Tr} \left[\prod_{r=0}^{R-1} \prod_{j=T-1}^0 W(j\hat{0} + r\hat{1}) \right] \exp \left[\frac{\beta}{4} \sum_x \text{Tr}(W(x) + W^\dagger(x)) \right] . \quad (1.93)$$

Para resolver analiticamente $W_{R,T}(\beta)$ precisamos transformá-lo num produto de integrais independentes.

¹¹ Também conhecido como calibre de árvore máxima (*maximal tree*); esta escolha fixa totalmente o calibre (cf. [84] e seção 3.2.5 da referência [22]).

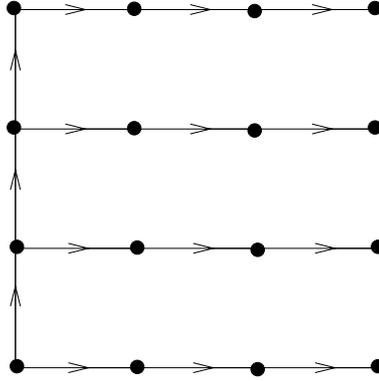


Fig. 1.9: Fixação do calibre tipo pente.

Definamos a quantidade $\tilde{w}(x)$:

$$\tilde{w}(x) \equiv \frac{1}{z} \int dW(x) \text{Tr} [AW(x)B] \exp \left(\frac{\beta}{4} \text{Tr}(W(x) + W^\dagger(x)) \right), \quad (1.94)$$

onde A e B são produtos de $W(y)$, $y \neq x$. A parte exponencial e a medida são invariantes frente a uma transformação $W(x) \rightarrow VW(x)V^\dagger$:

$$\tilde{w}(x) = \int dW(x) \text{Tr} [AVW(x)V^\dagger B] \exp \left(\frac{\beta}{4} \text{Tr}(W(x) + W^\dagger(x)) \right). \quad (1.95)$$

Integrando em V nos dois lados da equação acima e usando a condição de normalização da medida de Haar, temos a identidade:

$$\tilde{w}(x) = \frac{1}{z} \int dV \int dW(x) \text{Tr} [AVW(x)V^\dagger B] \exp \left(\frac{\beta}{4} \text{Tr}(W(x) + W^\dagger(x)) \right). \quad (1.96)$$

Usando o fato de que em $SU(2)$ [21]

$$\int dV V_{ij} V_{kl}^\dagger = \frac{1}{2} \delta_{il} \delta_{jk}, \quad (1.97)$$

obtemos que

$$\tilde{w}(x) = \text{Tr}(AB)w(\beta), \quad (1.98)$$

onde

$$w(\beta) = \frac{1}{z} \int dW \frac{1}{2} \text{Tr}[W] \exp \left(\frac{\beta}{4} \text{Tr}(W + W^\dagger) \right) \quad (1.99)$$

é a volta de Wilson correspondente a uma plaqueta apenas. Da expressão acima é claro que $w(\beta) \leq 1$ (o denominador $z(\beta)$ nunca é menor que o numerador). Iterando este argumento, e notando que o fator $1/2$ em (1.93) some com a última iteração, temos que

$$W_{R,T}(\beta) = (w(\beta))^{\hat{R}\hat{T}}, \quad (1.100)$$

onde $\hat{R}\hat{T}$ é o número de plaquetas dentro de $W_{R,T}$.

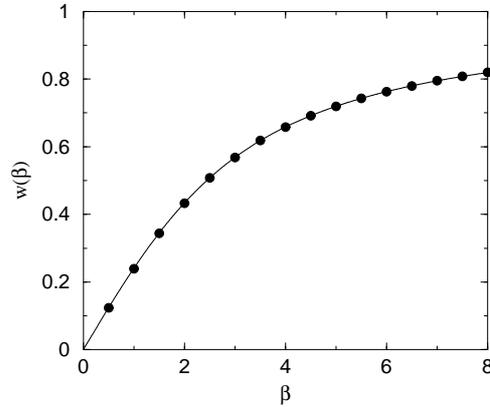


Fig. 1.10: Valor esperado da plaqueta como função de β para YM_2^2 , expressão (1.102). Os pontos são resultados de simulação em uma rede 32×32 ; os erros são muito pequenos e não foram graficados.

Assim, a tensão da corda adimensional é dada por

$$\hat{\sigma}(\beta) = - \lim_{\hat{R}, \hat{T} \rightarrow \infty} \frac{1}{\hat{R}\hat{T}} \log(W_{R,T}(\beta)) = -\log(w(\beta)) > 0 \quad (1.101)$$

revelando que *este modelo está numa fase confinante para todo valor da constante de acoplamento*. Isto é bastante razoável, já que em $1 + 1$ dimensões não existe componente transversal do bóson de calibre.

De acordo com a expressão (B.22) deduzida no Apêndice B temos

$$w(\beta) = \frac{I_2(\beta)}{I_1(\beta)}, \quad (1.102)$$

função graficada na figura 1.10 e comparada a resultados numéricos obtidos em uma rede 32×32 . Levando em conta um valor físico $\sqrt{\sigma} = 0.44$ GeV, podemos calcular a para cada

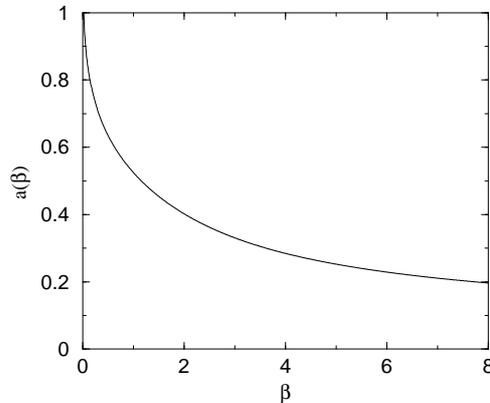


Fig. 1.11: Espaçamento da rede como função de β para YM_2^2 .

valor de β usando

$$a(\text{GeV}^{-1}) = \frac{\sqrt{\hat{\sigma}(\beta)}}{0.44}, \quad (1.103)$$

ou, como $a(\text{fm}) = a(\text{GeV}^{-1}) 0.19732 \text{ GeV fm}$,

$$a(\text{fm}) \sim 0.44 \sqrt{-\log \left(\frac{I_2(\beta)}{I_1(\beta)} \right)}. \quad (1.104)$$

A expressão acima está graficada na figura 1.11. A partir de (1.103) ou (1.104) podemos obter os valores físicos para as quantidades adimensionais obtidas nas simulações.

Capítulo 2

Propagador do glúon

2.1 Introdução

Em toda a Física, são as teorias de campos de calibre as que nos dão as mais precisas descrições dos dados experimentais [8]. Como é usual, citamos a verificação em sete casas no momento magnético anômalo do elétron, quantidade esta calculada analiticamente usando a teoria de perturbação na QED [85]. Foi baseado nesta teoria que apareceu, e está intimamente vinculada, um dos principais conceitos de teoria quântica de campos, a renormalização.

Os infinitos que aparecem nos diagramas de Feynman (realização pictórica dos termos da expansão perturbativa) são incorporados aos parâmetros iniciais do Lagrangiano, os quais agora são referidos como carga/massa nua, e não são mais entendidos como a carga/massa física. Isto é a renormalização e ela é feita ordem a ordem na expansão perturbativa (ou seja, alguns diagramas por vez). Nota-se que o processo da renormalização está estreitamente vinculado à teoria de perturbação. Assim, quando voltamos nossa atenção para teorias de campos em que a perturbação não pode ser usada, encontramos-nos em um território não suficientemente explorado.

Esse é o caso, em médias energias ($< 1 \text{ GeV}$), da QCD, teoria quântica de campos não-abeliana ($SU(3)$) que descreve a interação forte em termos de troca de cargas de cor entre *pártons* (quarks e glúons). Como se sabe [72, 73, 86], nesta teoria a constante de acoplamento decresce com o aumento da escala de energia e a teoria de perturbação ainda pode ser usada, levando a predições compatíveis em boa precisão com as medidas experimentais [85]. Este comportamento correção da constante de acoplamento¹ sugere que a QCD consiga descrever a principal característica da interação forte, qual seja, o confinamento de cor. No entanto, nesta região métodos não-perturbativos devem ser adotados inescapavelmente.

Entre as técnicas não-perturbativas destacamos as *equações de Dyson-Schwinger* (EDS) [17, 18], com resultados analíticos, mas aproximações ambíguas, e a formulação na *rede euclidiana* [19–22], introduzida no capítulo anterior, com resultados numéricos e erros controláveis. Colocadas sob este ponto de vista estas técnicas são claramente complementares.

Uma das quantidades mais usadas nestes estudos não-perturbativos é o propagador do glúon [31], função de Green de dois pontos para os campos de calibre. Em uma teoria confinante, o propagador da partícula mediadora deve ter características incomuns, já que, entre outras coisas, não se pode imaginá-la livre no infinito, ou seja, não caracterizaria

¹ *Running coupling constant*

um estado assintótico, conceito base para a *representação espectral de Källén-Lehmann* e formalismo de Lehmann-Symanzik-Zimmerman (LSZ) [87]. Como se não bastasse o interesse na investigação de suas propriedades analíticas como provável fonte de novos conceitos em teorias quânticas de campos, as peculiaridades do glúon sugerem que o conhecimento da forma desse propagador no infravermelho esclareça o mecanismo do confinamento.

Na teoria Yang-Mills pura (sem férmions) no calibre de Landau temos, além do propagador do glúon, a função de 2-pontos dos campos fantasmas, o *propagador do fantasma*. A compreensão do comportamento destes dois propagadores na região do infravermelho (IR) é de fundamental importância no cenário de confinamento de *Zwanziger-Gribov* [26, 27] e no, muito relacionado, critério de *Kugo-Ojima* [28]. Estas abordagens tentam descrever o confinamento de cor em termos da estrutura analítica do propagador do glúon e do fantasma: nestas duas visões equivalentes, o confinamento dos quarks é realizado por um propagador fantasma mais divergente que $1/k^2$ e o confinamento dos glúons por um propagador gluônico que se anule para $k^2 \rightarrow 0$. Nesta tese investigamos apenas o propagador do glúon com vistas a sua simulação numérica na rede euclidiana; o cálculo do propagador fantasma demandaria muito mais tempo computacional.

Neste capítulo, fazemos uma extensa discussão sobre as propriedades do propagador do glúon no contínuo: sua definição, comportamento perturbativo e previsões analíticas para regime não-perturbativo, produzidas utilizando-se principalmente as equações de Dyson-Schwinger. Estas formas analíticas possuem pólos e parâmetros livres que serão interpretados fisicamente em termos de massas e condensados. Apresentamos em seguida as principais visões a respeito do confinamento de cor baseadas em funções de Green. Por fim introduzimos o propagador do glúon no formalismo da rede, com vistas à obtenção de resultados numéricos, e revisamos o estado-da-arte das simulações.

2.2 Propagador do glúon

O formalismo de quantização utilizado em todo este trabalho é o de *integrais funcionais*, conceito já introduzido no capítulo anterior; é a abordagem mais utilizada atualmente, pois é extremamente flexível e eficiente em teorias não-lineares e com vínculos, como as teorias de calibre. A métrica mais apropriada para as aplicações na rede e no formalismo de Dyson-Schwinger é a euclidiana, ao passo que os resultados encontrados em livros-texto tradicionais usam a métrica de Minkowski² [1–6]; por isso vamos esclarecer alguns pontos a respeito de integrais funcionais nesta métrica.

A conexão entre quadrivetores no espaço de Minkowski³ e Euclides segue regras bastante simples:

$$i) \quad v^{m0} = -iv^{e0} ; \tag{2.1}$$

$$ii) \quad v^{mi} = v^{ei} , \tag{2.2}$$

que leva a

$$iii) \quad v^m_{\mu} v^{m\mu} = -v^e_{\mu} v^{e\mu} ; \tag{2.3}$$

² Uma exceção é [88], mas não é satisfatoriamente abrangente.

³ Assinatura da métrica é negativa: $\{g_{00} = 1, g_{ii} = -1 \text{ e } g_{\mu\nu} = 0 \text{ se } \mu \neq \nu\}$

$$iv) \quad v^e{}_\mu v^{e\mu} = v^{e\mu} v^{e\mu} = v^e{}_\mu v^e{}_\mu ; \quad (2.4)$$

$$v) \quad v^m{}_i = -v^e{}_i . \quad (2.5)$$

A relação (2.4) nos informa que a métrica euclidiana é o tensor $\delta_{\mu\nu}$ e, portanto, não é necessário cuidar se um índice é super- ou sub-escrito.

O gerador funcional da teoria de Yang-Mills no espaço Euclidiano é definido por

$$Z[J] = Z_0^{-1} \int \mathcal{D}A_\mu \exp \left(-S_{YM} + \int d^d x J_\mu(x) A_\mu(x) \right) , \quad (2.6)$$

onde, como deduzido no apêndice A,

$$S_{YM} = \int d^d x \mathcal{L}_{YM} , \quad (2.7)$$

$$\mathcal{L}_{YM} = \frac{1}{4} F_{\mu\nu}^a F_{\mu\nu}^a , \quad (2.8)$$

$$F_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + g f^{abc} A_\mu^b A_\nu^c . \quad (2.9)$$

A medida de integração $\mathcal{D}A_\mu$ é dada por

$$\mathcal{D}A_\mu = \prod_{x,\mu,a} dA_\mu^a(x) . \quad (2.10)$$

É importante também definir a *derivada funcional*

$$\int d^d x h(x) \frac{\delta F[J(x)]}{\delta J(x)} \equiv \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F[J(x) + \epsilon h(x)] - F[J(x)]}{\epsilon} , \quad (2.11)$$

onde $h(x)$ é uma função teste arbitrária. Como exemplo da definição acima temos o importante resultado

$$\frac{\delta J_\mu^a(y)}{\delta J_\nu^b(x)} = \delta_{ab} \delta_{\mu\nu} \delta^{(d)}(x - y) . \quad (2.12)$$

As *funções de Green totais de n-pontos* são definidas por

$$G_{\mu_1 \dots \mu_n}^{a_1 \dots a_n}(x_1, \dots, x_n) = \left[\frac{\delta^n}{\delta J_{\mu_1}^{a_1}(x_1) \dots \delta J_{\mu_n}^{a_n}(x_n)} Z[J_{\mu_1}^{a_1}(x_1), \dots, J_{\mu_n}^{a_n}(x_n)] \right] \Big|_{J=0} . \quad (2.13)$$

Já as *funções de Green conectadas de n-pontos*, $G_c{}_{\mu_1 \dots \mu_n}^{a_1 \dots a_n}(x_1, \dots, x_n)$, são definidas por fórmula similar à de cima, mas com Z trocada por W onde

$$W[J] \equiv \ln Z[J] . \quad (2.14)$$

Para completar o zoológico de funcionais geradores precisamos introduzir as *funções de vértice*, $\Gamma_{\mu_1 \dots \mu_n}^{a_1 \dots a_n}(x_1, \dots, x_n)$, as quais são obtidas a partir da *ação efetiva*

$$\Gamma[A_\nu^c, J] \equiv -W[J] + \int d^d x J_\mu(x) A_\mu^c(x) , \quad (2.15)$$

$$A_\mu^c(x) \equiv \langle A_\mu(x) \rangle_{[J]} = \frac{\delta W[J]}{\delta J_\mu(x)} , \quad (2.16)$$

novamente usando (2.13), mas trocando Z por Γ e J por $A_\mu^c(x)$. Antes de introduzir as equações de Dyson-Schwinger precisamos discutir as consequências da invariância de calibre da ação S_{YM} , pois a esta adiciona novos termos.

Todo valor esperado de operadores pode ser escrito em termos de uma integral funcional

$$\langle \mathcal{O}[A_\mu(x)] \rangle = \frac{1}{Z} \int [\mathcal{D}A_\mu(x)] \mathcal{O}[A_\mu(x)] e^{-S([A_\mu(x)])} . \quad (2.17)$$

A ação clássica de Yang-Mills (2.7) possui invariância de calibre local e para grandezas com esta propriedade a expressão (2.17) pode ser usada diretamente. No entanto, o *teorema de Elitzur* [89] diz que é impossível quebrar uma simetria de calibre local espontaneamente; em outras palavras, o valor esperado de quantidades *variantes* de calibre é nulo. Assim, para que quantidades variantes como o propagador do glúon façam sentido é preciso *fixar o calibre*. Isto é mais facilmente compreendido em termos de *órbitas*; exemplificaremos no caso mais simples da QED.

Duas configurações de campos de calibre A_μ e A'_ν pertencem à mesma órbita se elas estão conectadas por uma transformação de calibre:

$$A'_\mu(x) = A_\mu(x) - \partial_\mu \Lambda(x) . \quad (2.18)$$

Estas duas configurações descrevem a mesma Física e, portanto, devemos tomar apenas uma configuração desta órbita, chamada configuração representativa, para fazer a soma sobre todos os estados possíveis em (2.17). Por exemplo, a configuração dada por

$$A'_\mu(x) = \left(\frac{-1}{x+2y-z}, \frac{t}{(x+2y-z)^2}, \frac{2t}{(x+2y-z)^2}, \frac{-t}{(x+2y-z)^2} \right) \quad (2.19)$$

está na mesma órbita da configuração trivial $A_\mu(x) = 0$, pois

$$A'_\mu(x) = A_\mu(x) - \partial_\mu \Lambda = -\partial_\mu \Lambda, \quad \Lambda(x) = t/(x+2y-z) . \quad (2.20)$$

Em contrapartida, a configuração

$$A''_\mu(x) = \left(\frac{-1}{x+2y-z}, \frac{z}{(x+2y-z)^2}, \frac{2t}{(x+2y-z)^2}, \frac{-t}{(x+2y-z)^2} \right) \quad (2.21)$$

não pertence a esta órbita, pois não existe $\Lambda(x)$ tal que $\partial_\mu \Lambda(x) = -A''_\mu(x)$. Em outras palavras, não existe transformação de calibre que conecte $A_\mu = 0$ a $A''_\mu(x)$ e, portanto, elas descrevem o sistema em estados diferentes.

Como fazer para escolher apenas uma configuração de cada uma dessas órbitas? Conseguise isso através da escolha de uma *condição de calibre* do tipo

$$f(A_\mu) = 0 . \quad (2.22)$$

De acordo com a discussão acima, esta condição deve ter duas características básicas:

1. dada qualquer configuração $B_\mu(x)$, deve ser possível encontrar uma outra configuração $B'_\mu(x)$, na órbita de $B_\mu(x)$, tal que $f(B'_\mu) = 0$. $B'_\mu(x)$ será a configuração representativa da órbita;

2. uma, e apenas uma, configuração de cada órbita deve ser escolhida por (2.22), ou seja, se $B_\mu(x)$ e $B'_\mu(x)$ pertencem a mesma órbita e ambas respeitam (2.22), então $B_\mu(x) = B'_\mu(x)$;

Isto é ilustrado na figura 2.1.

Para o chamado *calibre temporal*, (2.22) é dada por

$$A_0(x) = 0 . \quad (2.23)$$

Vejamos se é possível achar na órbita de um campo arbitrário B_μ uma configuração que respeite a expressão acima:

$$A_0(x) = B_0(x) - \partial_0 \Lambda(x) \quad (2.24)$$

$$\partial_0 \Lambda(x) = B_0(x) \quad (2.25)$$

$$\Lambda(x) = \int B_0(x) dt . \quad (2.26)$$

Com $\Lambda(x)$ respeitando essa condição conseguiremos achar a configuração representativa da órbita. O raciocínio acima também mostra a validade do *calibre axial* $A_3(x) = 0$.

Outro interessante é o calibre de Landau

$$\partial_\mu A_\mu(x) = 0 ; \quad (2.27)$$

para obter a transformação de calibre necessária aplicamos o divergente aos dois lados de (2.18):

$$\partial_\mu A_\mu = \partial_\mu B_\mu - \square \Lambda \quad (2.28)$$

$$\Lambda = \frac{\partial_\mu B_\mu}{\square^{-1}} = \int d^4 x \frac{\partial_\mu B_\mu}{x^2} . \quad (2.29)$$

Note que algumas condições de calibres não obedecem à condição 1 acima (linha pontilhada na figura 2.1). Um exemplo trivial seria exigir uma condição do tipo

$$A_\mu = 0 . \quad (2.30)$$

Como mostrado acima, em 4-dimensões, alguns campos não podem alcançar esta configuração; no entanto, como visto para o calibre temporal, em 1 dimensão é válido (existe apenas a órbita trivial).

A condição 2 para a fixação de calibre é mais sutil e prorrogamos sua discussão para a seção 2.2.2 onde introduzimos o problema das cópias de Gribov.

A seleção da configuração representativa de uma órbita no formalismo funcional é feita através da introdução de uma delta de Dirac na integral funcional:

$$\int [\mathcal{D}\theta(x)] \det M_f \delta[f_a(A_\mu^\theta)] = 1, \quad (2.31)$$

onde $\det M_f$ está relacionado com o Jacobiano de f_a . Em calibres covariantes, usando invariança de calibre, a integral funcional em θ pode ser feita e os termos que sobram

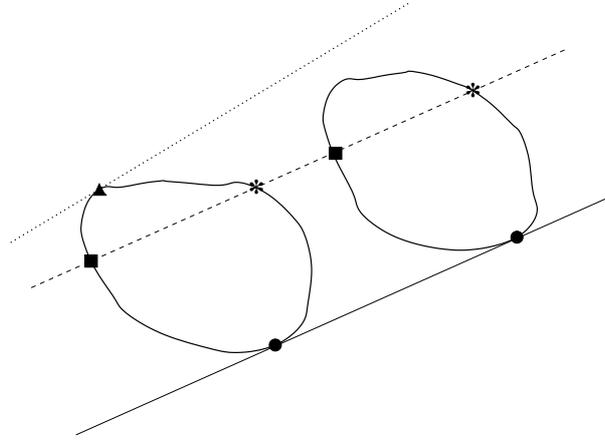


Fig. 2.1: Representação esquemática de duas órbitas de campos de calibre descrevendo dois estados físicos diferentes; as linhas correspondem a condições de calibre distintas. A linha sólida representa uma boa condição de calibre; a linha pontilhada não é adequada, pois não considera configuração na segunda órbita; a linha tracejada possui ambiguidades (as configurações \star são cópias de Gribov).

podem ser convertidos em exponenciais cujos expoentes se juntam aos da ação clássica de Yang-Mills. No final deste processo, conhecido como *procedimento de Faddeev-Popov* [90], podemos escrever uma ação efetiva [18, 88]

$$S_{YM}^{eff} = \int d^d x \mathcal{L}(x), \quad (2.32)$$

$$\mathcal{L}(x) = \frac{1}{4} F_{\mu\nu}^a F_{\mu\nu}^a + \frac{1}{2\xi} (\partial_\mu A_\mu^a)^2 + \bar{c}_a \partial_\mu [\delta_{ab} \partial_\mu - g f_{abc} A_\mu^c] c_b, \quad (2.33)$$

a qual é, por construção, não-invariante de calibre, apesar de possuir a simetria de Becchi-Rouet-Stora (BRS) [91], uma espécie de versão quântica da simetria de calibre. ξ é o *parâmetro de calibre*, o qual especifica a condição de calibre utilizada (*e.g.*, $\xi = 0, 1, \infty$ equivalem, respectivamente, ao calibre de Landau, Feynman e Unitário). Os novos campos c_b são chamados de campos de *Faddeev-Popov* ou fantasmas, por não possuírem realidade física (são apenas sub-produtos de um truque matemático que coloca na forma exponencial o determinante aparecendo em (2.31)).

Estamos prontos para introduzir as equações de Dyson-Schwinger; estas saem da simples observação de que a integral funcional de uma derivada funcional é zero (ver seção B.2)

$$\int \mathcal{D}\phi(x) \frac{\delta}{\delta\phi(x)} = 0. \quad (2.34)$$

Aplicamos esta identidade a nossa nova função geratriz com termos de fixação de calibre e de fantasmas

$$Z[J_\mu, \bar{\omega}, \omega] = \int \mathcal{D}\mu \exp(I[A_\mu, c, \bar{c}, J_\mu, \omega, \bar{\omega}]), \quad (2.35)$$

onde

$$I[A_\mu, c, \bar{c}, J_\mu, \omega, \bar{\omega}] = -S_{YM}^{eff}[A_\mu, c, \bar{c}] + \int d^d x (J_\mu^a A_\mu^a + \bar{\omega}_a c_a + \bar{c}_a \omega_a), \quad (2.36)$$

$$\mathcal{D}\mu \equiv \mathcal{D}A_\mu \mathcal{D}c \mathcal{D}\bar{c} . \quad (2.37)$$

Temos, por exemplo, para o caso do campo de fantasma

$$0 = \int \mathcal{D}\mu \frac{\delta e^{I[A_\mu, c, \bar{c}, J_\mu, \omega, \bar{\omega}]}}{\delta \bar{c}_a} \quad (2.38)$$

$$= \int \mathcal{D}\mu \left(\frac{-\delta S_{YM}^{eff}}{\delta \bar{c}_a} + \omega_a(x) \right) e^{I[A_\mu, c, \bar{c}, J_\mu, \omega, \bar{\omega}]} \quad (2.39)$$

$$= \left(\frac{-\delta S_{YM}^{eff}}{\delta \bar{c}_a} \left[\frac{\delta}{\delta J_\mu}, \frac{\delta}{\delta \omega_a}, \frac{\delta}{\delta \bar{\omega}_a} \right] + \omega_a(x) \right) Z[J_\mu, \bar{\omega}, \omega] . \quad (2.40)$$

A equação de movimento do fantasma é dada pela aplicação da derivada funcional a (2.33)

$$\frac{\delta S_{YM}^{eff}}{\delta \bar{c}_a} = \partial_\mu (D_\mu^{ab} c_b), \quad (2.41)$$

onde

$$D_\mu^{ab} = \delta^{ab} \partial_\mu - g f^{abc} A_\mu^c . \quad (2.42)$$

Aplicando uma derivada funcional à direita $\delta/\delta\omega_a$ em (2.40) obtemos

$$\left\langle \frac{\delta S_{YM}^{eff}}{\delta \bar{c}^a(x)} \bar{c}^b(y) \right\rangle = \delta^{ab} \delta^{(d)}(x - y) . \quad (2.43)$$

Substituindo (2.41) e (2.42) na expressão acima ficamos com

$$\begin{aligned} \delta^{ab} \delta^{(d)}(x - y) &= \left\langle \partial_\mu [\delta^{ab} \partial_\mu c^b(x) - g f_{abc} A_\mu^c c^b(x)] \bar{c}^b(y) \right\rangle \\ &= \left\langle \partial^2 c^a(x) \bar{c}^b(y) - g f_{abc} (\partial_\mu A_\mu^c) c^b(x) \bar{c}^b(y) - g f_{abc} A_\mu^c (\partial_\mu c^b(x)) \bar{c}^b(y) \right\rangle \end{aligned} \quad (2.44)$$

a qual pode ser reescrita como

$$\partial^2 G^{ab}(x - y) - g f^{acd} \int d^d z d^d z' \left(\partial_\mu^z \delta^{(d)}(z - x) \right) \delta^{(d)}(z - z') \langle c^c(z') \bar{c}^b(y) A_\mu^d(z) \rangle = \delta^{ab} \delta^{(d)}(x - y) , \quad (2.45)$$

onde definimos o propagador do fantasma como

$$G^{ab}(x - y) \equiv \langle c^a(x) \bar{c}^b(y) \rangle . \quad (2.46)$$

O valor esperado no segundo termo de (2.45) é uma função de Green de 3-pontos, a qual pode ser reexpressa em termos dos propagadores do fantasma, do glúon $D_{\mu\nu}^{ab}(x - y)$ e da *função de vértice fantasma-glúon*, $V_\nu^{abc}(x, y, z)$:

$$\langle c^c(z) \bar{c}^b(y) A_\mu^a(x) \rangle = - \int d^d u d^d v d^d w D_{\mu\nu}^{ad}(x - u) G^{ce}(z - v) V_\nu^{def}(u, v, w) G^{fb}(w - y) . \quad (2.47)$$

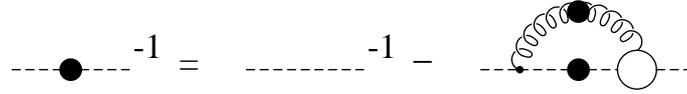


Fig. 2.2: Equação de Dyson-Schwinger para o propagador fantasma.

Substituindo a expressão acima em (2.45) obtemos a equação de Dyson-Schwinger para o propagador fantasma no espaço de coordenadas. No espaço de momenta sua interpretação é mais imediata:

$$[G^{ab}(k)]^{-1} = -\delta^{ab}k^2 + g^2 \epsilon^{acd} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} i k_\mu G^{ce}(q) V_\nu^{efb}(q, k) D_{\mu\nu}^{df}(k - q). \quad (2.48)$$

No lado esquerdo temos a função inversa do propagador fantasma (a auto-energia), enquanto do lado direito o primeiro termo é a inversa do propagador fantasma a nível de árvore ($-\delta^{ab}/k^2$) e o segundo são as correções advindas das interações fantasma-glúon. Sua representação pictórica é dada na figura 2.2.

Partindo de

$$\left\langle \frac{\delta S_{\text{YM}}^{\text{eff}}}{\delta A_\mu^a(x)} A_\nu^b(y) \right\rangle = \delta^{ab} \delta_{\mu\nu} \delta^{(d)}(x - y) \quad (2.49)$$

e fazendo considerações similares às de cima, chega-se à EDS para o propagador do glúon,

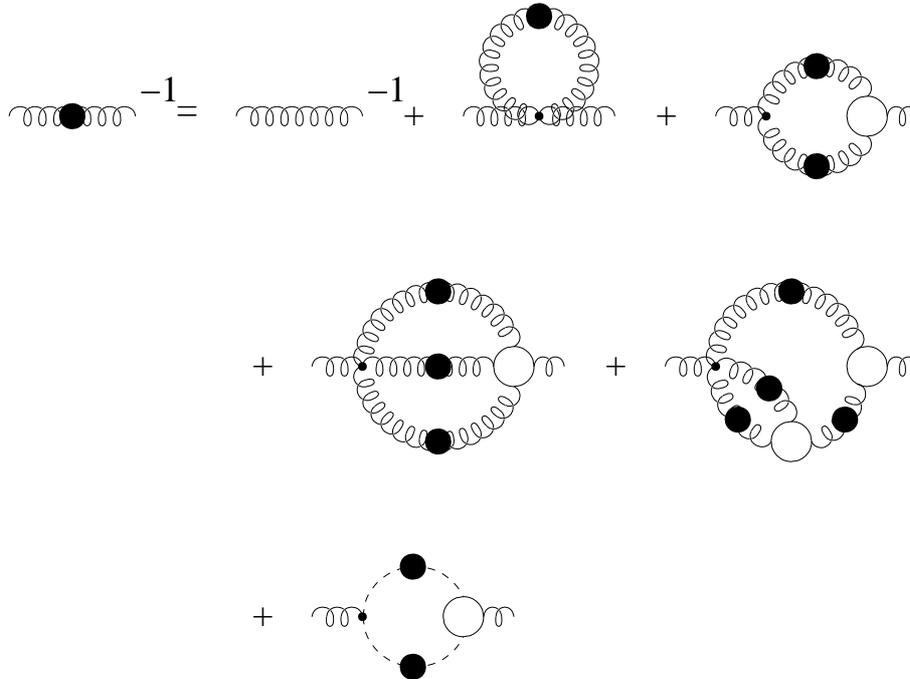


Fig. 2.3: Equação de Dyson-Schwinger para o propagador gluônico.

$$\begin{aligned}
 \delta^{ab} \delta_{\mu\nu} \delta^{(d)}(x-y) &= \left(-\partial^2 \delta_{\mu\rho} - \left(\frac{1}{\xi} - 1 \right) \partial_\mu \partial_\rho \right) \langle A_\rho^a(x) A_\nu^b(y) \rangle - g f^{ade} \langle (\partial_\mu \bar{c}^d(x)) c^e(x) A_\nu^b(y) \rangle \\
 &\quad + g f^{ade} \langle \{ (\partial_\rho A_\rho^d(x)) A_\mu^e(x) + (\partial_\mu A_\rho^d(x)) A_\rho^e(x) - 2(\partial_\rho A_\mu^d(x)) A_\rho^e(x) \} A_\nu^b(y) \rangle \\
 &\quad + g^2 f^{ack} f^{dek} \langle A_\rho^c(x) A_\mu^d(x) A_\rho^e(x) A_\nu^b(y) \rangle, \tag{2.50}
 \end{aligned}$$

representada pictorialmente na figura 2.3. Para maiores detalhes na dedução e representação no espaço de momenta sugerimos ao leitor o Apêndice C da referência [18] e os artigos originais [92, 93].

A invariância do gerador funcional frente a transformações BRS (ver B.2) leva à dedução das identidades de Slavnov-Taylor. Entre elas destaca-se

$$\langle \partial_\mu A_\mu^a(x) \partial_\nu A_\nu^b(y) \rangle = -\partial_\mu \partial_\nu D_{\mu\nu}^{ab}(x-y) = \xi \delta^{ab} \delta^{(d)}(x-y), \tag{2.51}$$

a qual nos diz (ver B.3) que o propagador do glúon tem a forma geral

$$D_{\mu\nu}^{ab}(k) = \delta^{ab} \left[\left(\delta_{\mu\nu} - \frac{k_\mu k_\nu}{k^2} \right) D(k^2) + \xi \frac{k_\mu k_\nu}{k^4} \right], \tag{2.52}$$

da qual tiramos a forma específica ao calibre de Landau ($\xi = 0$)

$$D_{\mu\nu}^{ab}(k) = \delta^{ab} \left(\delta_{\mu\nu} - \frac{k_\mu k_\nu}{k^2} \right) D(k^2). \tag{2.53}$$

2.2.1 Comportamento Ultravioleta

O comportamento ultravioleta dos propagadores é bem conhecido [7], pois nesta região a teoria de perturbação é aplicável. Como já conhecemos as equações de Dyson-Schwinger da teoria é fácil obter a hierarquia com que os diagramas se ordenam na teoria de perturbação; basta resolver as EDS iterativamente, tomando cuidado para manter os gráficos com mesmo número de loops ou, equivalentemente, potências de \hbar .

O propagador fantasma nos serve novamente como exemplo: a figura 2.4 mostra como é feita esta expansão perturbativa, onde tudo é expresso em termos de propagadores de glúons e de fantasmas a nível de árvore. No regime ultravioleta cada termo da série (com o mesmo número de loops) é menor que seu antecessor e por isso é possível truncá-la, mas conseguindo aproximar-se da solução exata adicionando-se novos termos sistematicamente. A cada propagador ou vértice corresponde uma determinada expressão analítica e são as regras de Feynman que fazem esta correspondência. Na figura 2.5 são apresentadas estas regras para o caso de Yang-Mills pura no espaço de Euclides.

A nível de árvore o propagador do glúon no calibre de Landau é dado por

$$D_{\mu\nu}^{ab}(k) = \delta^{ab} \left(\delta_{\mu\nu} - \frac{k_\mu k_\nu}{k^2} \right) \frac{1}{k^2}. \tag{2.54}$$

Contribuições logarítmicas devem ser adicionadas, mas quanto mais alta a energia do processo melhor a expressão acima descreve o propagador, já que nesta região os pártons comportam-se como partículas livres.

Fig. 2.4: *Expansão da EDS do propagador fantasma em teoria de perturbação.*

2.2.2 Comportamento Infravermelho

É claro que as maiores dúvidas sobre o comportamento do propagador do glúon encontram-se na região de baixas energias (região infravermelha), pois é onde os familiares métodos da teoria de perturbação perdem a validade. Deve-se então tentar resolver as EDS sem expansão na constante de acoplamento. Como as EDS são extremamente acopladas, algum tipo de truncamento é imprescindível e existem variadas justificativas físicas para os diferentes tipos de truncamento. É claro que resultados bastante distintos emergem de truncamentos diferentes.

Um complicador a mais no caso da teoria de Yang-Mills são as cópias de Gribov [26]; estas são configurações de campos da mesma órbita que são indevidamente escolhidas pela condição de calibre (esta deveria pegar apenas uma configuração por órbita, *c.f.* linha tracejada na figura 2.1). Em teoria de perturbação estas cópias são suprimidas na expansão da constante de acoplamento. Em análises no infravermelho, no entanto, elas deveriam estar sendo levadas em conta. Os estudos das EDS para obtenção do comportamento infravermelho do propagador do glúon em geral *relevam este problema*.

Como ilustração da ambiguidade de Gribov investigaremos a condição de calibre de Coulomb

$$\partial_i A_i^a(x) = 0. \tag{2.55}$$

Escolhamos como configuração representativa $A_i^a = 0$; uma outra configuração $A_i^a(x)$ na

mesma órbita de A_i^a pode ser obtida da lei de transformação dos campos de calibre

$$A'_i(x) = -\frac{1}{g}(\partial_i\Omega(x))\Omega(x) . \quad (2.56)$$

Se aplicarmos o divergente nos dois lados da equação acima e supormos que $\partial_i A_i^a(x) = 0$, o calibre de Coulomb será uma boa condição se

$$(\partial_i\partial_i\Omega(x))\Omega(x) + (\partial_i\Omega(x))(\partial_i\Omega(x)) = 0 \quad (2.57)$$

tiver solução apenas para $\Omega = 1$, ou seja, se $A_i^a(x) = A_i^a(x) = 0$. É fácil ver, por exemplo, que para $SU(2)$ [4, 26]

$$\Omega(x) = \frac{x^i\sigma_i}{r} \quad (2.58)$$

também é solução de (2.57).

Assim, a condição de calibre está considerando outras configurações além da escolhida como representativa. A maioria dos calibres padecem do problema de Gribov; o *calibre laplaciano* [94] é considerado livre destas cópias e tem sido ultimamente utilizado em simulações [95]. No calibre de Landau foi mostrado [96] que a contribuição das cópias de Gribov nas simulações do propagador do glúon é pequena, da ordem do erro estatístico. No entanto, tem bastante importância para o propagador do fantasma.

Uma alternativa encontrada por Zwanziger é o uso da *quantização estocástica* [97–99] a qual consegue a fixação completa de calibre, sem as ambiguidades de Gribov. Baseado neste formalismo, este autor recentemente sugeriu EDS com um termo adicional que leva em conta as cópias de Gribov [42].

2.2.3 Divergência

Até recentemente, estudos de EDS sobre o comportamento infravermelho do propagador do glúon eram unânimes em afirmar que este deveria divergir com $1/k^4$. Um grande estímulo para que este comportamento fosse em geral aceito foram os sucessos fenomenológicos na descrição do confinamento de quarks através destes glúons confinantes (*escravidão infravermelha* [9]). Também o trabalho de West [100] mostrava a existência de uma lei de área para a volta de Wilson como consequência de um propagador singular ($1/k^4$) para $k^2 \rightarrow 0$.

A maioria destes trabalhos foram feitos no calibre axial [101–105] o qual, por não ser covariante, dispensa a introdução de campos fantasmas, facilitando os cálculos. No entanto, parte da estrutura tensorial do propagador do glúon não era levada em conta, argumentando-se que sua contribuição era muito pequena; não por coincidência esta é a parte do propagador do glúon que corresponderia à presença de fantasmas na dinâmica deste calibre.

No calibre de Landau, onde existem, a importância destes campos continuou sendo explicitamente desprezada na maioria dos cálculos, pois estes usavam a chamada aproximação de Mandelstam [106]. Nesta aproximação a EDS do glúon fica tão simples quanto na figura 2.6. Neste calibre, com esta aproximação (sem fantasmas), o propagador do glúon também divergia com $1/k^4$ [106–108].

$$\text{gluon with self-energy}^{-1} = \text{gluon}^{-1} + \text{gluon with ghost loop}$$

Fig. 2.6: *Equação de Dyson-Schwinger para o propagador do glúon na aproximação de Mandelstam.*

2.2.4 Finitude e Anulamento

Cornwall [109], em 1982, introduz uma dependência não singular para o propagador do glúon no infravermelho

$$D_{\text{Cornwall}}(q^2) = \left[(q^2 + M^2(q^2)) \ln \frac{q^2 + 4M^2(q^2)}{\Lambda^2} \right]^{-1}, \quad (2.59)$$

onde

$$M(q^2) = M \left\{ \frac{\ln \frac{q^2 + 4M^2}{\Lambda^2}}{\ln \frac{4M^2}{\Lambda^2}} \right\}^{-6/11}, \quad (2.60)$$

utilizando na EDS do propagador do glúon o método conhecido como *pinch technique* [109, 110], na qual tenta-se extrair o máximo de informação invariante de calibre das funções de Green (esta técnica parece ser equivalente ao *método de campo de fundo*⁴ [111, 112]). Nota-se que para $q^2 \rightarrow 0$, (2.59) tende a um valor finito; para valores típicos dos parâmetros desta expressão, o propagador do glúon decresce monotonicamente com momentum crescente.

Em seu artigo sobre as cópias indesejadas que apareciam em teorias de Yang-Mills, Gribov [26] também propôs uma forma para o propagador do glúon

$$D_{\text{Gribov}}(q^2) = \frac{q^2}{q^4 + m^4}; \quad (2.61)$$

esta forma leva claramente a um propagador que se *anula* em momentum nulo e que não possui pólos reais. Stingl [113], baseado na EDS do glúon, generaliza esta forma, propondo

$$D_{\text{Stingl}}(q^2) = \frac{q^2}{q^4 + a^2 q^2 + b^4}; \quad (2.62)$$

e interpreta a e b em termos de condensados de glúons.

Recentemente, Alkofer e colaboradores [18, 114–116] reintroduziram o diagrama de fantasmas na análise da EDS, obtendo um sistema de equações acopladas entre o propagador do glúon e o do fantasma; como um de seus resultados, no infravermelho estes propagadores estão vinculados por um *expoente crítico* κ

$$D(q^2) \propto (q^2)^{2\kappa-1}, G(q^2) \propto (q^2)^{-1-\kappa}, \quad q^2 \rightarrow 0 \quad (2.63)$$

⁴ *Background field method*

ou seja, o propagador do glúon deve se anular para $\kappa > 1/2$ e o fantasma deve divergir. O valor específico de κ é de máxima importância, pois esclarece a verificação do *critério de Kugo-Ojima* para o confinamento de cor (ver abaixo). Em [116] encontrou-se o valor

$$\kappa = (93 - \sqrt{1201})/98 \approx 0.595 . \quad (2.64)$$

De acordo com estes autores, a constante de acoplamento corrigida deveria se comportar como

$$\alpha(q^2) = \alpha(\mu^2)[q^2 D(q^2; \mu^2)][q^4 G^2(k^2; \mu^2)] , \quad (2.65)$$

o que, de acordo com (2.63), causaria um *congelamento*⁵ da constante de acoplamento no infravermelho (ver figura 2.7).

Zwanziger em [42] usa quantização estocástica para extrair EDS com o termo extra, o qual dá conta das cópias de Gribov; desprezando este termo extra, com vistas a comparações com os cálculos correntes na literatura, Zwanziger obtém valores de κ para dimensões $1 + 1, 2 + 1$ e $3 + 1$. Em $3 + 1$ obtém o *mesmo* valor (2.64) e uma raiz extra $\kappa = 1$. Em $2 + 1$ dimensões obtém novamente duas soluções

$$\kappa \approx 0.648 \quad \text{e} \quad \kappa = 3/4 = 0.75 . \quad (2.66)$$

Anteriormente, este autor já havia feito importante contribuição à área ao apresentar um *quase-teorema*⁶ afirmando o *anulamento para momentum nulo do propagador do glúon na rede no limite em que o volume é infinito* [117].

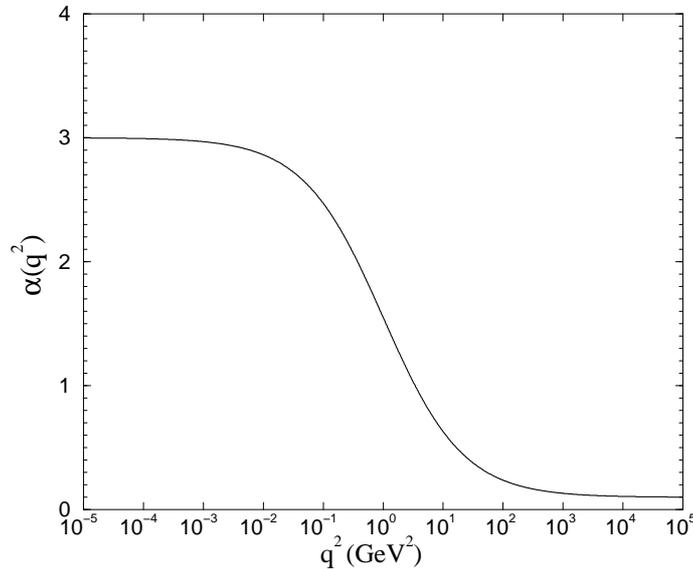


Fig. 2.7: *Congelamento da constante de acoplamento [118].*

⁵ *Freezing.*

⁶ Uma das hipóteses ainda não foi confirmada.

2.3 Confinamento: Kugo-Ojima e Zwanziger-Gribov

A previsão do confinamento de cor certamente é o mais importante teste pelo qual a QCD ainda tem que passar [119]. Muitas abordagens existem para o problema, mas pouco é realmente entendido sobre o mecanismo que faz com que apenas estados físicos brancos existam [120, 121].

Uma das abordagens é investigar se o comportamento das funções de Green de 2-pontos da QCD (propagador do quark, glúon e fantasma) pode esclarecer a dinâmica do confinamento. Duas abordagens, equivalentes, aparecem desde este ponto de vista [118]: o critério de Kugo-Ojima [28, 122, 123] e o de cenário de Zwanziger-Gribov [26, 27, 117, 124].

Em [28] Kugo e Ojima apresentam a quantização canônica de teorias não-abelianas; a partir desta abordagem eles encontraram duas condições suficientes para a existência de um espectro físico constituído apenas de partículas brancas: não deve haver pólo em $k^2 \rightarrow 0$ nas funções de correlação gluônicas (incluindo-se aí o propagador do glúon) e, no calibre de Landau, o propagador fantasma deve ser mais singular que uma partícula não-massiva, ou seja, deve divergir mais rápido que $1/k^2$ no infravermelho.

No outro cenário, a análise começa a partir da restrição imposta na integral funcional para que esta não considere cópias de Gribov. Este autor propôs que se considerasse apenas aquelas configurações cujo determinante de Fadeev-Popov, no calibre de Landau, fosse estritamente positivo

$$\partial_\mu A_\mu = 0 \quad \det M_f > 0 \quad , \quad (2.67)$$

de maneira que as cópias fossem desprezadas. A região, convexa, no espaço de configurações na qual (2.67) é respeitada é referida por Ω limitada pelo chamado *horizonte de Gribov* ($\partial\Omega$). No entanto, descobriu-se que mesmo esta zona não está livre das cópias [125]. A região livre de cópias é chamada de *região de módulos fundamentais*⁷ Λ ; de fato, ainda existem cópias de Gribov em sua fronteira, $\partial\Lambda$. Estas diferentes regiões estão esquematizadas na figura 2.8. De qualquer maneira, Zwanziger argumenta que os modos infravermelhos do campo de calibre estão próximos ao horizonte de Gribov e que, portanto, sua dinâmica deve estar vinculada a esta região a qual, por sua vez, está ligada ao determinante de Fadeev-Popov, ou seja, ao propagador fantasma. De acordo com este autor este propagador deveria ser mais singular que um pólo simples e que o propagador do glúon deveria se anular no infravermelho.

Como mencionado acima, também se ataca o problema do propagador usando quantização estocástica, na qual se consegue fixar completamente o calibre e não existem fantasmas. Isto pode parecer estranho quando confrontado com o cenário, acima descrito, de confinamento vinculado a singularidade do propagador fantasma. As abordagens tornam-se coerentes ao considerarmos que na quantização estocástica são considerados, além dos usuais transversais, os glúons longitudinais (não-físicos) os quais tomam parte do papel dinâmico dos fantasmas.

Em suma, *graus de liberdade não-físicos como fantasmas ou glúons longitudinais (posuem métrica negativa) são responsáveis pelas correlações de longo alcance*. Em particular, no calibre de Landau *imagina-se que os fantasmas confinem os quarks*.

⁷ *Fundamental modular region.*

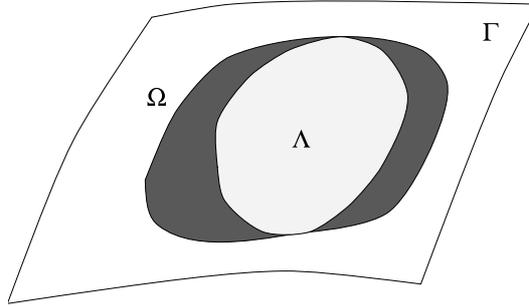


Fig. 2.8: Espaço de configurações transversas Γ , região de Gribov Ω e região de módulos fundamentais Λ . Notar que partes das fronteiras $\partial\Omega$ e $\partial\Lambda$ são comuns [126].

2.4 Propagador do glúon na rede

Nesta tese estudamos o propagador do glúon usando a ação de Wilson (1.48), em $2 + 1$ dimensões e em $SU(2)$ (YM_3^2),

$$S_W[U_\mu(x)] = \beta \sum_x \sum_{1 \leq \mu < \nu \leq 3} \left[1 - \frac{1}{4} \text{Tr}(P_{\mu\nu}(x) + P_{\mu\nu}^\dagger(x)) \right], \quad (2.68)$$

com

$$\beta = \frac{4}{g^2 a}. \quad (2.69)$$

Como no capítulo 1, parametrizamos os elementos de $SU(2)$ na forma

$$U \equiv U_0 \mathbb{1} + i \vec{U} \cdot \vec{\sigma}. \quad (2.70)$$

Definimos o campo de calibre adimensional na rede como

$$\hat{A}_\mu(x) \equiv \frac{1}{2} [U_\mu(x) - U_\mu^\dagger(x)] = i \vec{U}_\mu(x) \cdot \vec{\sigma}; \quad (2.71)$$

o campo correspondente com dimensões físicas é dado por

$$A_\mu(x) \equiv \hat{A}_\mu(x) / \sqrt{a}. \quad (2.72)$$

Como usual, multiplicamos a equação (2.71) por uma matriz geradora de $\mathfrak{su}(2)$, tomamos o traço, usamos

$$\frac{\text{Tr}(\sigma^a \sigma^b)}{2} = \delta^{ab}, \quad (2.73)$$

e obtemos as componentes do campo de calibre na rede:

$$\hat{A}_\mu^b(x) \equiv \frac{1}{2i} \text{Tr} [\hat{A}_\mu(x) \sigma^b] = U_\mu^b(x). \quad (2.74)$$

Expandindo a expressão (1.38) do capítulo anterior em potências de a temos

$$U_\mu(x) = e^{-aA_\mu(x)} = \mathbb{1} - aA_\mu(x) + \mathcal{O}(a^2); \quad (2.75)$$

substituindo a expressão acima em (2.71) obtemos

$$\begin{aligned}\hat{A}_\mu(x) &= -aA_\mu(x) + \mathcal{O}(a^3), \\ \frac{1}{2i}\text{Tr}(\hat{A}_\mu(x)\sigma^b) &= \frac{-a}{2i}\text{Tr}(A_\mu(x)\sigma^b) + \mathcal{O}(a^3), \\ \hat{A}_\mu^b(x) &= \frac{ag}{2}A_\mu^b(x) + \mathcal{O}(a^3),\end{aligned}\quad (2.76)$$

onde usamos (ver (A.42))

$$A_\mu^b(x) \equiv \frac{i}{g}\text{Tr}[A_\mu(x)\sigma^b]. \quad (2.77)$$

A expressão (2.76) nos leva a uma conexão com o contínuo na forma

$$a^{-1}\hat{A}_\mu^b(x) \xrightarrow{a \rightarrow 0} \frac{g}{2}A_\mu^b(x). \quad (2.78)$$

Introduzimos agora o propagador do glúon na rede:

$$\hat{D}_{\mu\nu}^{bc}(x-y) \equiv \langle \hat{A}_\mu^b(x) \hat{A}_\nu^c(y) \rangle; \quad (2.79)$$

para sua forma dimensional temos $D_{\mu\nu}^{bc}(x-y) = \hat{D}_{\mu\nu}^{bc}(x-y)/a$. Como demonstrado na seção B.4, a partir da definição acima temos o propagador do glúon no espaço de momentum dado por

$$\hat{D}(0) \equiv \frac{1}{9N^3} \sum_{\mu,b} \left\langle \left[\sum_x \hat{A}_\mu^b(x) \right]^2 \right\rangle, \quad (2.80)$$

$$\hat{D}(k) \equiv \frac{1}{6N^3} \sum_{\mu,b} \left\langle \left\{ \left[\sum_x \hat{A}_\mu^b(x) \cos(2\pi k \cdot x) \right]^2 + \left[\sum_x \hat{A}_\mu^b(x) \sin(2\pi k \cdot x) \right]^2 \right\} \right\rangle, \quad (2.81)$$

onde $\mu = 1, 2, 3$ e k tem componentes (k_x, k_y, k_t) ; estes podem assumir valores $k_\mu N_\mu \equiv 0, 1, \dots, N_\mu - 1$. O propagador é estudado como função do momentum da rede dado por

$$\mathfrak{p}(k) \equiv \sqrt{\sum_{\mu=1}^3 \mathfrak{p}_\mu^2(k)} \equiv 2 \sqrt{\sum_{\mu=1}^3 \sin^2(\pi k_\mu)}, \quad (2.82)$$

o qual se aproxima do equivalente momentum no contínuo com mais rapidez.

De acordo com (2.78), a conexão entre o propagador do glúon na rede e no contínuo se dá como

$$a^{-1}D_{\mu\nu}^{ab}(x) \xrightarrow{a \rightarrow 0} \frac{g^2}{4}D_{\mu\nu}^{ab}(x), \quad (2.83)$$

que no espaço de momentum fica⁸

$$a\hat{D}(k) \xrightarrow{a \rightarrow 0} \frac{g^2}{4}D(k). \quad (2.84)$$

⁸ $\hat{D}(k) = D(k)/a^2$

2.4.1 Fixação de calibre na rede

Diferentemente do contínuo, não há necessidade na rede de introduzir-se campos fantasmas na ação para que o calibre seja fixado e quantidade variantes de calibre calculadas.

Na rede o procedimento se divide em duas etapas: primeiro, gera-se uma configuração de elos $U_\mu(x)$ apenas considerando-se a medida de integração e o peso de Feynman; segundo, para cada uma destas configurações deve-se proceder a transformações de calibre que levem $U_\mu(x)$ a uma configuração $\tilde{U}_\mu(x)$ que respeite a condição de calibre $f(\tilde{U}) = 0$ escolhida. É seguir o procedimento de Faddeev-Popov de trás-para-frente, sendo completamente equivalente a ele⁹.

No caso do calibre de Landau em YM_3^2 as configurações de elos que correspondam a um mínimo local do funcional

$$\mathcal{E}_U[g] \equiv 1 - \frac{1}{3V} \sum_{\mu=1}^3 \sum_x \frac{\text{Tr}}{2} [g(x) U_\mu(x) g^\dagger(x + \hat{\mu})] \quad (2.85)$$

produzem uma divergência discretizada nula (ver B.5):

$$\left(\nabla \cdot \hat{A}\right)^b(x) \equiv \sum_{\mu=1}^3 \left[\hat{A}_\mu^b(x) - \hat{A}_\mu^b(x - \hat{\mu})\right] = 0 \quad \forall x, b. \quad (2.86)$$

O valor desta quantidade será o critério utilizado para a interrupção do algoritmo de busca do mínimo de (2.85). Outra quantidade que analizaremos são as *cargas* Q

$$\Sigma_Q \equiv \frac{1}{3} \sum_{\mu=1}^3 \frac{1}{3N} \sum_{a=1}^3 \sum_x [Q_\mu^a(x_\mu) - \bar{Q}_\mu^a]^2 [Q_\mu^a]^{-2}, \quad (2.87)$$

onde

$$Q_\mu^c(x_\mu) \equiv \sum_{\nu \neq \mu} \sum_{x_\nu} \hat{A}_\mu^c(x) \quad \mu = 1, 2, 3; \quad (2.88)$$

Σ_Q deve ser zero para uma configuração fixada.

2.5 QCD com duas cores, sem quarks e em 2+1 dimensões

Nesta tese abordamos o problema da interação forte fazendo três grandes aproximações: *i*) usamos o grupo de cor $SU(2)$ (ao invés de $SU(3)$), *ii*) desconsideramos os quarks e *iii*) trabalhamos em 2+1 dimensões. A motivação principal para elas é economia computacional simplesmente. Matrizes $SU(3)$ envolvem 8 parâmetros reais livres (as 8 matrizes de Gell-Mann) enquanto $SU(2)$ envolve apenas 3 (as 3 matrizes de Pauli)¹⁰; a inclusão de quarks

⁹ Notamos que se pode produzir um banco de elos sem fixação de calibre e usá-los em várias ocasiões diferentes usando o calibre que se queira.

¹⁰ Pode-se parametrizar as matrizes $SU(3)$ usando 9 números complexos, ou seja, 18 números reais, os quais não são independentes entre si, pois estão vinculados através de propriedades do grupo. Computacionalmente o que importa é que para $SU(3)$ precisamos destes 18 números reais e em $SU(2)$ apenas de 4.

Fig. 2.9: *Aproximação por apagamento [129].*

dinâmicos envolve a inversão de matrizes gigantescas, processo 100 vezes mais custoso que a geração de elos; o caso realístico de uma simulação em $3+1$ dimensões em uma rede L^4 seria L vezes mais pesada que a rede equivalente em $2+1$. Mesmo assim, vamos argumentar que os resultados destas simulações podem ser muito úteis no entendimento do caso realístico.

A restrição menos séria do ponto de vista físico é a troca de $SU(3)$ por $SU(2)$; ambos os grupos são não-abelianos e, portanto, envolvem o auto-acoplamento entre os bósons de calibre. É este auto-acoplamento entre os bósons o responsável pela liberdade assintótica e, espera-se, pelo confinamento da carga de cor. Fisicamente, havendo apenas duas cores, os singletos possíveis são apenas mésons, ou seja, pares quark-antiquark (não existem bárions em $SU(2)$). Esta é uma das razões pelas quais se faz simulações para QCD em duas cores para densidade finita ($\mu \neq 0$) [127,128]. Usualmente este tipo de simulação sofre do problema do sinal: o expoente do peso de Gibbs é complexo para $SU(3)$ e os métodos tradicionais de Monte Carlo não podem ser usados. Em $SU(2)$ a ação não é complexa mesmo para $\mu \neq 0$ e simulações Monte Carlo podem ser feitas normalmente. O fato da anticor equivaler à anticarga bariônica significa que todas as partículas do sistema possuem carga bariônica nula e, no fundo, o que se está fazendo é simulação para $\mu_B = 0, T \neq 0$. Outra importância do domínio de técnicas de simulação do grupo $SU(2)$ está no âmbito das interações fracas, onde a quebra espontânea da simetria deste grupo é estudada.

A ausência de quarks das simulações é a primeira vista preocupante, mas como nosso interesse está no regime infravermelho as interações dominantes serão entre os glúons. Uma das grandes motivações para se fazer simulações apenas com campos de calibre são os sucessos da *aproximação por apagamento*¹¹.

Suponhamos que estamos interessados em calcular a massa do pión através do estudo da função de correlação de dois pontos a ele associada

$$C_\pi(x) = -\langle \bar{u}\gamma_5 d(x) \bar{d}\gamma_5 u(0) \rangle; \quad (2.89)$$

¹¹ *Quenched approximation.*

do decaimento exponencial desta quantidade podemos extrair sua massa [130]. A função geradora da QCD total pode ter os férmions integrados analiticamente (já que sempre aparecem em formas bilineares)

$$Z_{\text{QCD}} = \int [dU] \exp(-S_W) \prod_q \det(\mathcal{D}_{\text{lat}} + m_q^{\text{din}}), \quad (2.90)$$

levando a

$$\begin{aligned} C_\pi(x) &= Z_{\text{QCD}}^{-1} \int [dU] \exp(-S_W) \prod_q \det(\mathcal{D}_{\text{lat}} + m_q^{\text{din}}) \\ &\times \text{Tr} \left[\gamma_5 \left(\frac{1}{\mathcal{D}_{\text{lat}} + m_d^{\text{val}}} \right)_{x,0} \gamma_5 \left(\frac{1}{\mathcal{D}_{\text{lat}} + m_u^{\text{val}}} \right)_{0,x} \right]. \end{aligned} \quad (2.91)$$

Para encontrar o determinante aparecendo em (2.91) precisamos inverter uma matriz gigantesca envolvendo campos de calibre (estes estão no termo \mathcal{D} de derivada covariante discretizada). Como mencionado, isto é extremamente pesado computacionalmente.

Note que em (2.91) distinguimos entre massas de quarks dinâmicos e de valência; *a priori* não deveria haver razão para esta distinção, pois no Lagrangiano da QCD aparece apenas um tipo de massa. No entanto, com esta diferenciação e fazendo m^{din} bastante massivos, a simulação fica mais rápida: é a chamada *aproximação por apagamento parcial*. Se fizermos $m^{\text{din}} \rightarrow \infty$ o determinante fica constante e pode ser dispensado do valor esperado de $C_\pi(x)$. Esta é a mencionada aproximação por apagamento e equivale a ignorar as voltas de quarks (figura 2.9).

Apesar de parecer uma aproximação bastante radical os resultados para o espectro de massas produzido na $q\text{QCD}$ ¹² tem uma discrepância de apenas 10 – 20% [131] em relação aos valores experimentais. Este é um grande indicativo do *papel dominante dos glúons no regime infravermelho*.

A terceira aproximação é, de fato, a mais drástica, pois sabemos que duas teorias quânticas de campos com mesmo Lagrangiano diferem bastante de uma dimensionalidade para outra (ϕ^3 em 6 dimensões, por exemplo, possui liberdade assintótica [7, 132]). Nosso argumento no entanto se baseia na conjectura [26, 133] de que, essencialmente, a dinâmica especial da QCD provém das severas restrições ao espaço de configurações $\{A_\mu(x)\}$ imposta pela invariância de calibre de grupos não-abelianos (*e.g.*, se $a_\mu(x)$ e $b_\mu(x)$ pertencem a mesma órbita apenas uma destas configurações deve ser considerada na integral funcional). A motivação para esta conjectura não muda para 2 + 1 dimensões.

A teoria Yang-Mills pura $SU(2)$ em 2 + 1 dimensões que consideramos nesta tese (YM_3^2) possui uma constante de acoplamento g^2 com dimensão de massa, sendo portanto super-renormalizável. Sua interação Coulombiana é confinante já a nível clássico

$$\begin{aligned} V_c(\vec{x}) &\propto g^2 \int d^2q \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}}}{q^2}, \\ &\propto g^2 \log(|\vec{x}|). \end{aligned} \quad (2.92)$$

¹² *Quenched QCD*.

A paridade e o momentum angular não comutam em YM_3^2 (a rotação em $2D$ é abeliana). Essas diferenças em relação a YM_4^3 são compensadas pelas semelhanças entre as duas teorias.

Ambas possuem *liberdade assintótica*. No caso de YM_3^2 g^2 tem dimensão de massa e para a expansão perturbativa numa escala μ de energia podemos compor um parâmetro adimensional dado por

$$g_3^2(\mu) \equiv g^2/\mu \xrightarrow{\mu \rightarrow \infty} 0 ; \quad (2.93)$$

em YM_4^3 conhecemos bem o comportamento do parâmetro de expansão (expressão (1.70))

$$g_4^2(\mu) \propto -\frac{1}{\ln(\Lambda_L/\mu)} \xrightarrow{\mu \rightarrow \infty} 0 . \quad (2.94)$$

As duas expressões acima também sugerem que as duas teorias possuem *escravidão infravermelha*, ou seja, a constante de acoplamento aumenta com a diminuição de μ e boa parte da Física interessante se encontra no regime não-perturbativo. Nesta região, simulações na rede euclidiana indicam que *ambas* as teorias possuem potencial confinante $V(r) \propto \sigma r$, onde σ é a tensão da corda. O espectro de massas dos estados ligados de glúons (*glueballs*) também são semelhantes nas duas teorias [74].

Tendo em mente estas justificativas para as aproximações feitas, consideramos o estudo de YM_3^2 uma alternativa econômica e frutífera em relação ao ataque direto à pesada QCD total.

2.6 Estágio das simulações do propagador do glúon na rede

Revisamos nesta seção os resultados mais recentes para o propagador do glúon na rede. Esta quantidade é primordialmente simulada no calibre de Landau [134–136]: covariante, bastante explorado analiticamente e cujas configurações geradas são suaves. Outro calibre que vem despertando interesse é o de Coulomb [137–139], já que a componente $D_{44}(\vec{x}, t = 0)$ do propagador do glúon tem uma interpretação direta em termos de potencial de interação. Ambos os calibres sofrem do problema das cópias de Gribov apesar de que no de Landau já foi mostrado que sua influência numérica é pequena. Recentemente tem-se explorado o calibre Laplaciano nas simulações [94, 140, 141], já que supostamente fixa univocamente o calibre.

2.6.1 Calibre de Landau

As primeiras simulações do propagador do glúon foram realizadas por Mandula e Olgive [134, 135] para YM_4^3 utilizando o calibre de Landau, sendo este implementado na forma de minimização de um funcional, após a geração dos elos livres da condição de calibre [142]. O calibre de Landau é bastante explorado analiticamente e as configurações de elos com ele são *suaves*, ou seja, possuem flutuações similares a de quantidades invariantes de calibre (*e.g.*, a plaqueta). Estes autores ajustaram seus dados para uma função de Schwinger para

o propagador livre¹³

$$C(t) \propto \cosh(M|t - T/2|), \quad (2.95)$$

$$\sinh(aM/2) = am/2, \quad (2.96)$$

onde T é largura temporal da rede e m é a *massa efetiva do glúon*¹⁴ a qual governa o decaimento de $C(t)$. Seus resultados indicam uma massa efetiva crescente com a separação t , algo possível apenas para uma *função espectral não-positiva definida* (do contrário a massa deveria cair monotonicamente). Introduzem em trabalho posterior [144] a técnica de sobre-relaxação como modo eficiente de fixar o calibre .

Seguem-se investigações sobre o papel das cópias de Gribov na formulação na rede euclidiana [145–147] e conclue-se que de fato o funcional $\mathcal{E}_U[g]$ possui vários mínimos, manifestação da ambiguidade de Gribov na rede. De fato, a escolha do mínimo depende bastante do algoritmo utilizado na minimização [148]; a alternativa de se encontrar um mínimo absoluto para $\mathcal{E}_U[g]$ constitui um problema de complexidade não-polinomial¹⁵. Posterga-se a avaliação da importância numérica destas cópias nas simulações.

Como salientado acima, havia uma predominância em achar que o propagador do glúon deveria ser divergente em momentum nulo para que houvesse confinamento. Marenzoni e colaboradores fazem simulações de alta estatística no calibre de Landau e obtém um comportamento do tipo

$$D_{\text{Marenzoni}}(q^2) = \frac{Z}{M^2 + q^{2(1+\gamma)}} \quad (2.97)$$

onde $\gamma = 0.2 - 0.3$ seria uma dimensão anômala; este propagador *não* divergiria para $q^2 = 0$. Os autores argumentam que $M^2 \neq 0$ pode ser um artifício proveniente do volume finito da rede, sendo a expressão (2.97) ainda compatível com um propagador divergente no infravermelho. Em trabalho posterior [149], Marenzoni descarta a possibilidade de M^2 se anular com aumento do volume, implicando em um propagador do glúon finito para $q^2 = 0$.

Bernard, Parrinello e Soni introduzem o estudo do propagador do glúon no espaço de momentum, mostrando que as configurações geradas neste espaço são bem menos correlacionadas que no espaço real. Obtém o mesmo resultado de Mandula e Olgivie quanto ao crescimento da massa efetiva do glúon. Além disso, ajustam seus dados bastante satisfatoriamente à fórmula de Gribov (2.61). Um problema com esta fórmula é que $q^2 D(q^2)$ tenderia a um valor constante para $q^2 \rightarrow \infty$, enquanto que o comportamento observado nas simulações é o de decaimento potencial, $q^{-2\gamma}$, com $\gamma \sim 0.35$, compatível com o resultado de Marenzoni *et al.*. Assim, a fórmula de Gribov deveria ser considerada apenas para a região infravermelha.

O estudo do propagador do fantasma se mostra cada vez mais necessário à medida que os resultados provenientes de EDS sugerem um propagador do glúon não divergente. De acordo com o critério de Kugo-Ojima e o cenário de Zwanziger-Gribov um propagador do fantasma singular teria papel fundamental no mecanismo de confinamento. Começam então a aparecer simulações deste propagador [96, 150].

¹³ Cf. seção 2.2.1 da referência [22].

¹⁴ Esta quantidade já havia sido investigada por Bernard em 1982 [143], mas utilizando quantidades invariantes de calibre em $SU(2)$.

¹⁵ Como no caso do *problema do caixeiro-viajante (traveling salesman problem)* e estado fundamental em *vidros de spin*

Na argumentação de Zwanziger as cópias de Gribov deveriam ter papel fundamental na determinação do propagador do fantasma sendo portanto imprescindível a análise do impacto numérico destas cópias. Cucchieri mostra em 1997 [96] que a influência destas cópias é da ordem do erro estatístico do propagador do glúon (*ruído de Gribov*) e, portanto, pode ser desprezado; em contrapartida, sua importância é relativamente grande para o propagador do fantasma e deve ser levado em conta nas simulações.

O mesmo autor continua a linha de investigação no cenário de Zwanziger-Gribov e estuda os valores do propagador do glúon em momentum nulo para volumes crescentes em YM_4^3 [151]; de acordo com o cenário esta quantidade deve ir a zero, o que é sugerido pelas simulações, mas estas são realizadas em redes pequenas ($30^4, 16^4, 20^4$ e 24^4) e no regime de acoplamento muito forte ($\beta = 0, 0.8, 1.2$ e 1.6). Para ter acesso a redes maiores Cucchieri investiga a teoria YM_3^2 [32] e obtém, novamente, decrescimento de $D(0)$ com o crescimento do volume. Mais que isto, pela primeira vez uma investigação numérica encontra *decaimento de $D(q^2)$ na direção infravermelha* a partir de $p_{dec} \sim 350 MeV$. O maior volume investigado em [32] foi 64^3 ($\beta = 4.2, 5.0, 6.0$), proporcionando dados até $p \sim 120 MeV$ para o primeiro momentum não-nulo ($\beta = 4.2$). Apesar de ser evidente este decrescimento do propagador a partir de p_{dec} , redes maiores eram necessárias para elevar o pequeno número de dados com momentum menor que p_{dec} e ter acesso *quantitativo* ao comportamento infravermelho do propagador do glúon possibilitando a comparação com previsões analíticas. Esta, de fato, é a motivação da presente tese.

Paralelamente a estes desenvolvimentos, o grupo australiano investiga redes grandes (até $32^3 \times 64$ em $\beta = 6.2$) em YM_4^3 [41] e ajustam seus dados as formas de Cornwall (2.59), Gribov (2.61), Stingl (2.62), Marenzoni (2.97), entre outras. Dentre estas formas mais conhecidas a que possui melhor ajuste chi-quadrado é a de Cornwall ($\chi^2/n.g.l. \sim 50$), sendo que as de Gribov e Stingl saem-se muito mal ($\chi^2/n.g.l. \sim 800$). Os autores alertam, no entanto, que estas últimas formas foram construídas para funcionar no infravermelho, onde conseguiram número insuficiente de pontos.

Em 2001, este grupo apresenta novos resultados para o propagador do glúon [33, 152] desta vez usando uma ação melhorada do tipo Lüscher-Weisz com inclusão da correção de diagramas tipo girino¹⁶ [153] para acessar o comportamento físico com espaçamentos de rede maiores. Suas simulações alcançam redes $32^3 \times 64$ com $\beta = 6.0$ equivalendo a um espaçamento $a = 0.10 fm$ e volume físico de $3.18^3 \times 6.34 fm^4$. Ajustando seus dados para momentum nulo como função *linear* de $1/V$ encontram $D(0) \rightarrow 7.95(13) GeV^{-2}$ para volume infinito; isto convalida o propagador do glúon finito em $q^2 = 0$. Os autores, no entanto, ainda não descartam a possibilidade de que $D(q^2)$ vá a zero vagarosamente no volume infinito, de acordo com o cenário de Zwanziger-Gribov.

2.6.2 Calibre de Coulomb

Um cenário simples de confinamento aparece no calibre de Coulomb onde a componente $4 - 4$ do propagador gluônico pode ser decomposta na forma

$$D_{44}(\vec{x}, t) = V_{coul}(|\vec{x}|)\delta(t) + P(\vec{x}, t); \quad (2.98)$$

¹⁶ *Tadpole improvement.*

Zwanziger conjectura [154] que, para grande R , $V_{coul}(R) \sim \sigma_{coul} R$; este comportamento a grandes distâncias seria suficiente para o confinamento da carga de cor. Similarmente ao calibre de Landau o confinamento dos glúons é revelado pelo anulamento das componentes transversais $D^{tr}(\vec{k})$ do propagador do glúon em momentum nulo. Mostra também que, como o termo de polarização $P(\vec{x}, t)$ blinda a carga de cor, o potencial $V_W(R)$ entre um par quark-antiquark (*cf.* expressão (1.58)) será menor que a contribuição do potencial coulombiano, $V_W(R) \leq -C V_{coul}(R)$, onde $C = (N^2 - 1)/2N$ (na representação fundamental de $SU(N)$). Em [155] Zwanziger generaliza o resultado para uma representação D qualquer dos quarks em $SU(N)$ e obtém

$$V_D(R) \leq -C_D V_{coul}(R), \quad (2.99)$$

onde C_D é o Casimir da representação. A expressão acima implica que *não existe confinamento se o potencial no calibre de Coulomb não for confinante.*

Estes comportamentos para $V_{coul}(R)$ e $D^{tr}(\vec{k})$ são avalizados por simulações realizadas no calibre de Coulomb em $SU(2)$ [137, 139]. Um ajuste à forma de Gribov (2.61) de qualidade excelente para os dados de $D^{tr}(\vec{k})$ é obtido em [138].

2.6.3 Calibre Laplaciano

Em 1992 Vink e Wiese propõem uma forma de fixação de calibre que eliminaria a ambiguidade de Gribov por completo, o calibre Laplaciano [94, 156], covariante como o calibre de Landau. De fato, apenas um conjunto excepcional de configurações apresentaria cópias, mas a probabilidade disto acontecer em uma simulação é virtualmente nula.

Comparando os resultados do propagador do glúon em $SU(2)$ e $SU(3)$ com as formas analíticas mais conhecidas Alexandrou *et al.* [141, 157] encontram melhor ajuste para a forma de Cornwall; em $SU(3)$ encontram diferenças consideráveis em relação aos resultados no calibre de Landau ($16^3 \times 32, \beta = 6$). Um resultado interessante é a aparente insensibilidade de $D(0)$ no calibre Laplaciano frente ao aumento de volume, em contraste direto com a previsão teórica de Zwanziger.

Mandula mostra [158] usando teoria de perturbação na rede que as configurações geradas no calibre de Landau e Laplaciano diferem em $\mathcal{O}(g^2)$, ou seja, quanto menor β , maiores serão as diferenças nos resultados destes dois calibres; na região de escalamento (β grande) os dois calibres apresentariam, portanto, resultados similares. Isto reforça o resultado de Cucchieri de que o ruído Gribov é pequeno para o propagador do glúon.

Em [159] são mostrados resultados para o propagador do glúon no calibre Laplaciano os quais apresentam grande sensibilidade aos artificios da rede (espaçamento e volume finitos), em comparação ao que acontece no calibre de Landau. Estes resultados refutam a insensibilidade de $D(0)$ em relação ao volume encontrada por Alexandrou *et al.* em [141, 157].

2.6.4 Fixação de calibre na quantização estocástica

A quantização estocástica [97] se baseia no fato de que a distribuição de probabilidade euclidiana $P_0(A) = N \exp[-S_{YM}[A]]$ é solução de equilíbrio da equação de Fokker-Planck

$$\frac{\partial P}{\partial \tau} = \int d^d x \frac{\delta}{\delta A_\mu^a(x)} \left(\frac{\delta P}{\delta A_\mu^a(x)} + \frac{\delta S_{YM}}{\delta A_\mu^a(x)} P \right), \quad (2.100)$$

onde τ é uma dimensão extra que mede o número de varreduras. A equação acima é microscopicamente equivalente à equação de Langevin

$$\frac{\partial A_\mu^a}{\partial \tau} = -\frac{\delta S_{YM}}{\delta A_\mu^a} + \eta_\mu^a; \quad (2.101)$$

η_μ^a é o ruído branco Gaussiano definido por $\langle \eta_\mu^a(x, \tau) \rangle = 0$ e $\langle \eta_\mu^a(x, \tau) \eta_\nu^b(y, \tau') \rangle = 2\delta^{(d)}(x - y)\delta_{\mu\nu}\delta^{ab}\delta(\tau - \tau')$. Nesta forma, quantidades invariantes de calibre podem ser calculadas quando a distribuição P relaxa para a de equilíbrio; no entanto, funções variantes de calibre (como as funções de Green de n-pontos) não estão bem definidas e o programa de renormalização não pode ser diretamente aplicado.

Zwanziger propõe [98, 160] a introdução de um termo fixador de calibre para que quantidades dependentes de calibres pudessem ser calculadas neste formalismo:

$$\frac{\partial A_\mu^a}{\partial \tau} = -\frac{\delta S_{YM}}{\delta A_\mu^a} + D_\mu^{ac}v^c + \eta_\mu^a, \quad (2.102)$$

$$D_\mu^{ab} = (\partial_\mu \delta^{ac} + f^{abc}A_\mu^b)v^c, \quad (2.103)$$

$$v^a = \xi^{-1}\partial_\lambda A_\lambda^a(x, \tau); \quad (2.104)$$

ξ é o parâmetro de calibre tradicional. A adição desse termo não altera os valores esperados de quantidades invariantes de calibre, mas introduz uma “força” restauradora tangente às órbitas. O problema de Gribov é assim desviado e não precisamos nos preocupar mais com as cópias. A equação de Langevin modificada (2.102) é equivalente a uma (modificada) equação de Fokker-Planck:

$$\frac{\partial P}{\partial \tau} = \int d^d x \frac{\delta}{\delta A_\mu^a(x)} \left(\frac{\delta P}{\delta A_\mu^a(x)} - K_\mu^a P \right), \quad (2.105)$$

onde a “força de arraste” K_μ^a é dada por

$$K_\mu^a(x) \equiv -\frac{\delta S_{YM}}{\delta A_\mu^a(x)} + D_\mu^{ac}v^c. \quad (2.106)$$

Sendo uma equação de Langevin para campos de calibre a qual evita as ambiguidades de Gribov, a expressão (2.102) é uma candidata natural a simulações em computadores. Mizutani e Nakamura [161, 162] propõe uma versão discretizada desta equação:

$$U_\mu(x, \tau + \Delta\tau) = \omega^\dagger(x, \tau) \exp(i f_\mu^a t^a) U_\mu(x, \tau) \omega(x + \hat{\mu}, \tau), \quad (2.107)$$

$$f_\mu^a = -\frac{\delta S_{YM}}{\delta A_\mu^a(x)} \Delta\tau + \eta_\mu^a \sqrt{\Delta\tau}, \quad (2.108)$$

onde os ω 's são matrizes de rotação

$$\omega = \exp(i\beta \Delta^a t^a \Delta\tau / \xi); \quad (2.109)$$

e

$$\Delta^a(x) \equiv \sum_\mu 2\text{Im}[\text{Tr}[t^a(U_\mu(x) - U_\mu(x - \hat{\mu}))]] \quad (2.110)$$

é uma versão discretizada de $\partial_\mu A_\mu^a$ (t^a são os geradores da álgebra $\mathfrak{su}(3)$).

Usando esta prescrição os autores fizeram simulações em redes tão grandes quanto $48^3 \times 64$ a $\beta = 6.8$ para $SU(3)$ e $\xi = 0.1$. Obtêm novamente o resultado original de Mandula de que a função espectral do propagador no glúon não é positiva definida e sua massa efetiva cresce com a separação entre fatias de tempo. Ademais, seus resultados indicam que o propagador não possui pólo simples, mas sim *pares complexo-conjugados de singularidades no plano q^2* indicando excitações gluônicas de curta duração.

Capítulo 3

Simulações

“The purpose of computing is insight, not numbers.”

R. W. Hamming, 1962.

“Lattice QCD is entering the high-precision age.”

G. P. Lepage, 2002.

3.1 Introdução

É bastante comum que os problemas atacados pelos físicos tenham um número de graus de liberdade extremamente alto; nestes casos, uma abordagem estatística é quase indispensável, já que a capacidade computacional necessária para métodos determinísticos ainda está longe de ser alcançada. O procedimento estatístico mais utilizado é o *método de Monte Carlo*, bastante comum em estudos de estado sólido e física estatística, onde o número de partículas é da ordem de 10^{23} .

Tradicionalmente uma área de resultados analíticos, a teoria quântica de campos, com seus infinitos graus de liberdade, também pode ser investigada numericamente quando traduzida para o formalismo da rede euclidiana. Como já vimos no capítulo 1, a discretização do espaço-tempo torna o número de graus de liberdade finito, adequado para uso em computadores.

Neste capítulo, apresentamos o método de Monte Carlo e algumas de suas particularidades [22, 39]. Em seguida, detalhamos dois métodos bem conhecidos de atualização de configurações, o algoritmo de Metrópolis e de Banho-Térmico, este último também em sua versão sobre-relaxada. Para uso na fixação de calibre precisaremos de algoritmos de minimização discutidos na seção 3.4. Por último, explicamos como foi feita a paralelização dos algoritmos com vistas ao seu uso em uma pilha de pc's.

3.2 Método de Monte Carlo

3.2.1 Integrais multidimensionais

Na Física frequentemente quer-se calcular *numericamente* valores esperados de observáveis; a expressão básica é

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{[\phi]} A[\phi] e^{-\beta H[\phi]}}{\sum_{[\phi]} e^{-\beta H[\phi]}} , \quad (3.1)$$

onde A é o observável, H pode se referir tanto a um Hamiltoniano quanto a uma Ação, ϕ são os graus de liberdade dos quais H é função, e β é o inverso da temperatura ou uma constante de acoplamento. Em sistemas complexos não é uma tarefa trivial avaliar $\langle A \rangle$ exatamente já que isto é a soma sobre todos os possíveis valores que os graus de liberdade do sistema podem assumir.

Por exemplo, no modelo de Ising, a magnetização é explicitamente dada por

$$\langle M \rangle = \frac{\sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \dots \sum_{s_N=\pm 1} M(s_1, s_2, \dots, s_N) e^{-\beta H(s_1, s_2, \dots, s_N)}}{\sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \dots \sum_{s_N=\pm 1} e^{-\beta H(s_1, s_2, \dots, s_N)}} , \quad (3.2)$$

onde s_i corresponde ao spin no sítio i (N sítios); 2^N termos existem se abrirmos as somas acima o que para uma pequena rede de 10×10 perfaz $\sim 10^{30}$ termos! Se levarmos 1 *ns* para executar uma única operação de ponto flutuante como a adição, o que corresponde a um computador de 1 Gigaflap (\sim um Pentium IV de 2.4 GHz), o cálculo estará pronto em 10^{21} s; para comparação, a idade do universo é de $\sim 10^{17}$ s.

É claro que é imprescindível alguma aproximação aqui e o método de Monte Carlo é a técnica mais utilizada. Ela se baseia no fato de que qualquer integral pode ser estimada a partir de seu integrando avaliado em pontos sorteados dentro do intervalo de integração:

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_a^b f(x) dx = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{b-a}{N} \sum_{\alpha=1}^N f(x^\alpha) , \\ x^\alpha \text{ aleatoriamente escolhida no intervalo } [a, b]. \end{array} \right. \quad (3.3)$$

Um modo mais eficiente de obter esta integral é notar que alguns pontos contribuem mais que outros e, portanto, deveriam ser privilegiados nos sorteios. Nesta simples observação se baseia a *amostragem por relevância*: fazemos o sorteio baseado em um *peso* aparecendo na integral

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_a^b f(x) p(x) dx = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N f(x^\alpha) , \\ \int_a^b p(x) dx = 1 , \\ x^\alpha \text{ escolhida de acordo com } p(x) \text{ no intervalo } [a, b]. \end{array} \right. \quad (3.4)$$

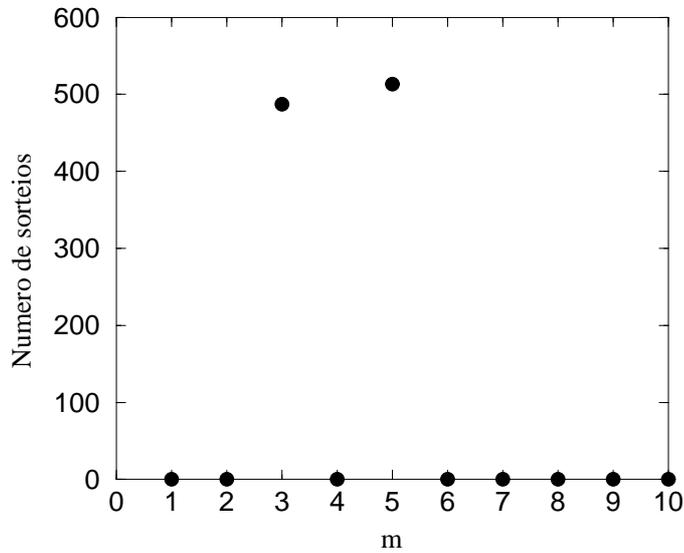


Fig. 3.1: Distribuição $p(m)$.

Porém, qual o significado de “escolhida de acordo com $p(x)$ ”? Vejamos um exemplo bem simples.

Suponhamos que se queira calcular a seguinte soma

$$S = \sum_{m=1}^{10} f(m)p(m) \quad (3.5)$$

com

$$p(m) = \frac{\delta_{m3} + \delta_{m5}}{\sum_{n=1}^{10} (\delta_{n3} + \delta_{n5})} \quad (3.6)$$

e $f(m)$ qualquer; temos trivialmente que

$$S = \frac{f(3) + f(5)}{2} \quad (3.7)$$

e

$$p(3) = p(5) = \frac{1}{2}. \quad (3.8)$$

Para usar o método Monte Carlo neste simples problema precisamos de uma amostra de números inteiros distribuídos de acordo com $p(m)$, ou seja, se graficarmos o histograma¹ da amostra de, digamos, 1.000 sorteios, ele deveria dar um resultado similar aquele mostrado na figura 3.1. Neste caso simples, a geração da amostra é trivial: gera-se no programa um número aleatório z no intervalo $[0, 1)$ (em geral isto é feito com algo como `z=rand()`). Arbitra-se que se z estiver em $[0, 0.5)$ o número inteiro sorteado é 3, do contrário o número

¹ Histograma de uma amostra de números é a contagem de quantos destes números pertencem a um intervalo especificado.

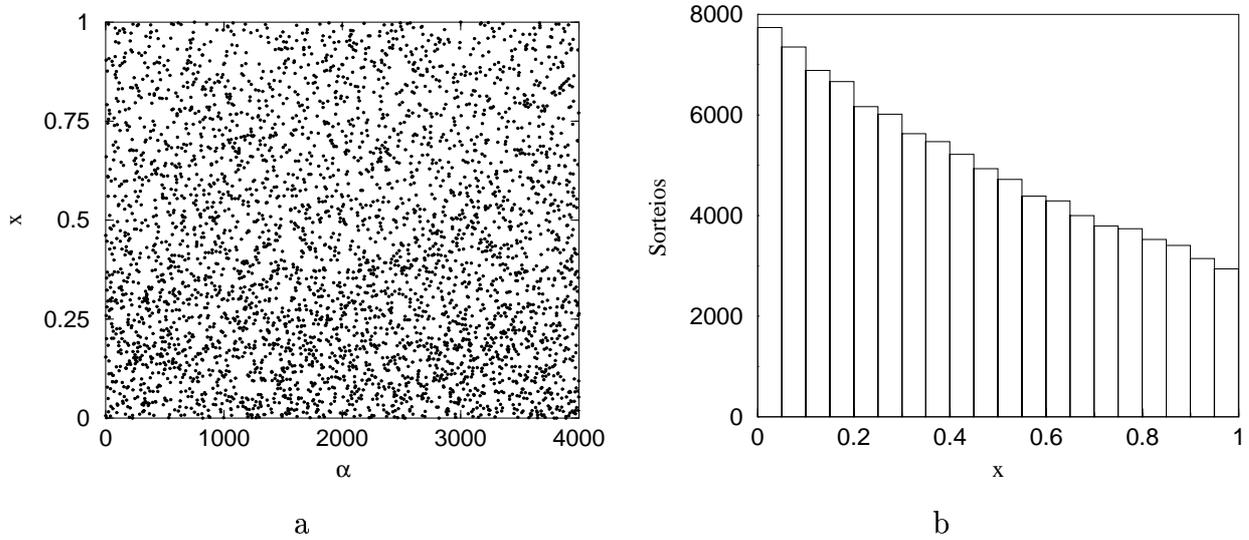


Fig. 3.2: *Distribuição exponencial.*

sorteado é 5; assim, existem 50% de chances de cada um ser escolhido. Fazendo isso mil vezes obtém-se uma amostra do tipo

$$S^{(1000)} = \{m^{(1)}, m^{(2)}, m^{(3)}, \dots, m^{(1000)}\} = \{3, 3, 5, \dots, 5\} \quad (3.9)$$

cujo histograma é o que queríamos obter.

Para uma variável contínua o procedimento é bastante similar. Para gerar uma amostra com uma distribuição arbitrária $p(x)$ duas técnicas são muito usadas: os métodos da *transformação inversa* e o do *aceita-rejeita*.

Como um exemplo da geração de uma amostra através do método da transformação inversa consideraremos a distribuição exponencial²:

$$p(x) = \frac{e^{-x}}{\int_0^1 e^{-x} dx} = \frac{e}{e-1} e^{-x}. \quad (3.10)$$

Seja u uma variável estocástica com distribuição uniforme em $(0, 1]$ ³; com ela podemos gerar uma nova variável x através da transformação

$$x = -\log(u). \quad (3.11)$$

O procedimento é formado por dois passos: gera-se u e calcula-se x a partir de sua definição (3.11). Graficando o número sorteado pela sequência em que foi sorteado obtém-se algo como o mostrado na figura 3.2.a; mesmo visualmente já é possível notar uma maior concentração de pontos para valores menores de x . O histograma destes sorteios é mostrado na figura 3.2.b a qual tem claramente um comportamento de decaimento exponencial. Assim, foi

² A qual é um caso especial da distribuição Gama, $p_k(x) = x^{k-1} \lambda^k e^{-\lambda x} / \Gamma(k)$ [163].

³ Note que excluímos o zero do sorteio, visto que aplicaremos o logaritmo sobre o resultado. O intervalo de sorteio depende do algoritmo do gerador de números aleatórios.

gerada uma amostra $\mathcal{S}_{exp} = \{x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(\alpha)}, \dots, x^{(10^5)}\}$ com uma distribuição exponencial. Portanto, uma boa aproximação para uma integral com peso exponencial seria

$$\int_0^1 f(x)p(x)dx \sim \frac{1}{10^5} \sum_{\alpha=1}^{10^5} f(x^{(\alpha)}) , \quad x^{(\alpha)} \in \mathcal{S}_{exp} . \quad (3.12)$$

Os passos seguidos acima podem ser colocados numa forma mais familiar à teoria de probabilidades. Como sabemos, para variáveis estocástica contínuas, a probabilidade de encontrar a variável em num intervalo $[a, b]$ é dado por

$$P(a \leq x \leq b) = \int_a^b p(x)dx , \quad (3.13)$$

onde $p(x)$ é a *densidade de probabilidade*. A probabilidade de que x esteja entre a e $a + da$ é dada por

$$P(a \leq x \leq a + da) = p(a)da . \quad (3.14)$$

É possível gerar uma densidade de probabilidade $p'(x)$ a partir de outra $p(x)$ usando

$$p'(y) = \int_{\alpha}^{\beta} p(x)\delta(y - y(x))dx . \quad (3.15)$$

Como em geral partimos da distribuição uniforme $p(x) = 1$ ($\alpha = 0, \beta = 1$) temos

$$p'(y) = \int_0^1 \delta(y - y(x))dx = \int_0^1 \delta(x - x(y)) \left| \frac{dy(x)}{dx} \right|^{-1} dx . \quad (3.16)$$

No exemplo da distribuição exponencial teríamos, a partir de $y = -\ln x$,

$$p'(y) = \int_0^1 \delta(x - e^{-y}) \left| \frac{-1}{x} \right|^{-1} dx = e^{-y} . \quad (3.17)$$

Generalizando o procedimento, teríamos para integrais duplas

$$p'(w, z) = \int_0^1 \int_0^1 dx dy \delta(z - z(x, y)) \delta(w - w(x, y)) \quad (3.18)$$

$$= \int_0^1 \int_0^1 dx dy \delta(x - x(z, w)) \delta(y - y(z, w)) |J(z, w; x, y)|^{-1} , \quad (3.19)$$

onde

$$|J(x, y; u, v)| = \left\| \begin{array}{cc} \frac{\partial z}{\partial x} & \frac{\partial z}{\partial y} \\ \frac{\partial w}{\partial x} & \frac{\partial w}{\partial y} \end{array} \right\| = \left| \frac{\partial z}{\partial x} \frac{\partial w}{\partial y} - \frac{\partial z}{\partial y} \frac{\partial w}{\partial x} \right| . \quad (3.20)$$

Um exemplo da utilidade de (3.19) é a geração de números com distribuição gaussiana usando o método de Box-Muller [85, 163]. Sejam duas variáveis estocásticas $x, y \in [0, 1]$; podemos gerar duas outras variáveis estocásticas z e w

$$z = \sqrt{-2 \log x} \cos(2\pi y) , \quad (3.21)$$

$$w = \sqrt{-2 \log x} \sin(2\pi y) , \quad (3.22)$$

as quais terão distribuição gaussiana. O Jacobiano da transformação acima é dado por $2\pi/x$, onde

$$x = e^{-\frac{w^2+z^2}{2}}; \quad (3.23)$$

de acordo com (3.19) temos

$$\begin{aligned} p'(w, z) &= \int_0^1 dx \int_0^1 \delta(x - x(z, w))\delta(y - y(z, w)) \frac{x}{2\pi} \\ &= \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{w^2+z^2}{2}}, \end{aligned} \quad (3.24)$$

ou seja, $p'(w, z) = p'(w)p'(z)$ com

$$p'(a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-a^2/2}. \quad (3.25)$$

É claro que o jacobiano não pode ser nulo para que o método da transformação inversa possa ser usado.

Quando estas manipulações analíticas deixam de ser possíveis ou eficientes é necessário utilizar o método do aceita-rejeita (ver seção 16.2.3 da referência [39]), o qual não precisa da função inversa da distribuição de probabilidade. Assume-se que a distribuição de probabilidade $p(x)$ pode ser toda colocada abaixo de uma outra densidade de probabilidade $h(x)$, fácil de ser amostrada, vezes uma constante C (figura 3.3); formalmente temos que

$$p(x) \leq C h(x). \quad (3.26)$$

O método consiste de dois passos: sorteia-se um número u com a distribuição $h(x)$ e outro v com distribuição uniforme entre 0 e 1; se

$$\frac{p(u)}{C h(u)} \leq v \quad (3.27)$$

aceita-se o número u , do contrário se o rejeita e recomeça no primeiro passo.

Aprendemos como gerar um número com uma dada distribuição, o que pode ser facilmente generalizado para a geração de um vetor (\vec{x}) de números a serem usados nas integrais multidimensionais. Como vimos, precisamos gerar vários \vec{x} para poder calcular a média usando (3.4); vamos distinguir através de um índice α cada um desses diferentes vetores gerados e chamar cada \vec{x}^α de uma *configuração*. Começa-se com um valor arbitrário para \vec{x}^0 e procede-se a sua *atualização*, para gerar novos pontos que serão usados para calcular

$$\int dx_1 \int dx_2 \dots \int dx_M f(x_1, x_2, \dots, x_M) p(x_1, x_2, \dots, x_M) \sim \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\alpha=1}^{\mathcal{N}} f(x_1^\alpha, x_2^\alpha, \dots, x_M^\alpha). \quad (3.28)$$

Cada $\vec{x}^\alpha = (x_1^\alpha, x_2^\alpha, \dots, x_M^\alpha)$ corresponde a uma diferente configuração⁴.

⁴ Em geral, a maior parte do trabalho computacional em uma simulação numérica vem da atualização das configurações. Nesta tese especificamente, veremos, no entanto, como a fixação do calibre pesa mais que as atualizações em redes grandes.

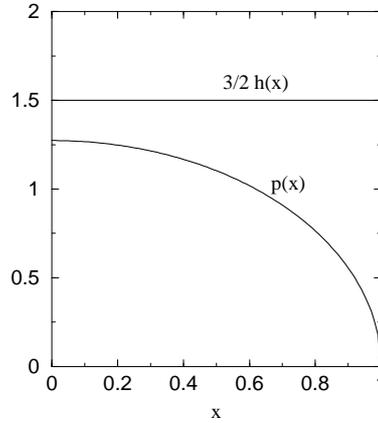


Fig. 3.3: Ilustração do método do aceita-rejeita: a constante C vale $3/2$, $h(x) = 1$ é uma distribuição uniforme e $p(x) = 4/\pi\sqrt{1-x^2}$. Sorteiam-se dois números aleatórios u e v uniformemente distribuídos; se $\sqrt{1-u^2} \leq 3\pi v/8$ aceita-se u .

Até aqui não nos restringimos a nenhuma forma analítica específica para $p(x_1, \dots, x_M)$. No entanto, na Física, a forma exponencial,

$$p(x_1, x_2, \dots, x_M) = \frac{e^{-\beta S(x_1, x_2, \dots, x_M)}}{\int dx_1 \int dx_2 \dots \int dx_M e^{-\beta S(x_1, x_2, \dots, x_M)}} , \quad (3.29)$$

aparece frequentemente e a ela nos restringiremos (β é uma constante). Esta é a bem conhecida *distribuição de Maxwell-Boltzmann* e nosso problema agora consiste em encontrar algum procedimento que nos forneça configurações

$$\mathcal{S} = \{\vec{x}^{(1)}, \vec{x}^{(2)}, \dots, \vec{x}^{(N)}\} \quad (3.30)$$

distribuídas de acordo com (3.29). Da mecânica estatística sabemos que a cada configuração em \mathcal{S} corresponde um sistema no *ensemble canônico*. No que segue discutimos o conceito de ensemble.

3.2.2 Ensembles

Começamos com um sistema Ising de dois sítios com condições de contorno livres (Is2); este sistema Is2 pode estar em apenas quatro diferentes estados:

$$\begin{aligned} \uparrow\downarrow & \text{ configuração 1} \\ \downarrow\uparrow & \text{ configuração 2} \\ \uparrow\uparrow & \text{ configuração 3} \\ \downarrow\downarrow & \text{ configuração 4} \end{aligned} \quad (3.31)$$

Os estados 1 e 2 são caracterizados por um número $n=0$, e os demais por $n = 1$ ($n = s_1 + s_2$). A energia destes estados está relacionada a este número n através de

$$E_n = (2n - 1) J ; \quad (3.32)$$

E_0 é, portanto, a energia do estado fundamental.

Uma coleção (abstrata) muito grande do mesmo sistema físico é chamada de *ensemble*. Um ensemble do nosso sistema Is2 pode ter todos seus sistemas constituintes no estado 1, metade no estado 1 e a outra metade no estado 3, um quarto em cada estado, e assim por diante; não existe restrição a sua composição. De forma que possamos caracterizar um ensemble nós introduzimos uma *densidade do ensemble*, $\vec{W}(\phi)$, um vetor cujas componentes são a fração populacional dos estados dentro do ensemble (ϕ especifica o estado). Por exemplo, para um ensemble com seus sistemas distribuídos em igual número nos estados 1, 2, 3 e 4, nós temos

$$\vec{W}(\phi) = (W(1), W(2), W(3), W(4)) \quad (3.33)$$

com

$$W(1) = W(2) = W(3) = W(4) = \frac{1}{4}. \quad (3.34)$$

Vamos etiquetar as densidades com um índice α de modo que seja fácil distinguir os vários ensembles que podem existir (*e.g.*, $\vec{W}^{(23)}$ se refere ao ensemble #23).

Uma questão importante que aparece é como conectar diferentes ensembles. Esta questão é melhor compreendida considerando-se o efeito de uma perturbação em todos os sistemas de um ensemble; por hipótese, esta perturbação não causa uma transição determinística do sistema, ou seja, se o sistema está no estado 1 ele não irá sempre para o estado 4, por exemplo, mas apenas tem uma certa probabilidade de ir para aquele estado. Chamamos isto de *perturbação estocástica*. O novo ensemble será obviamente relacionado a esta *probabilidade de transição*, a qual pode ser definida através de

$$W^{(n+1)}(\phi') = \sum_{[\phi]} P(\phi' \leftarrow \phi) f(\{W^{(i)}(\phi)\}) \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (3.35)$$

Assim, por exemplo, a fração de sistemas no ensemble #23 no estado 1 é dado por

$$W^{(23)}(1) = \sum_{\phi=1,2,3,4} P(1 \leftarrow \phi) f(\{W^{(i)}(\phi)\}) \quad i = 1, 2, \dots, 22. \quad (3.36)$$

Das definições acima, duas condições gerais devem ser respeitadas por estas quantidades:

$$\sum_{[\phi]} W(\phi) = 1, \quad (3.37)$$

$$\sum_{[\phi']} P(\phi' \leftarrow \phi) = 1. \quad (3.38)$$

O exemplo do sistema Is2 é facilmente generalizado; em particular, para situações em que os estados ϕ do sistema precisam ser distinguidos por um índice contínuo, trocam-se as somas por integrais.

Um caso específico de (3.35) se destaca: se a nova densidade de ensemble sorteada só depende de sua predecessora imediata dizemos que o processo estocástico é do tipo *markoviano* [36]:

$$W^{(n+1)}(\phi') = \sum_{[\phi]} P(\phi' \leftarrow \phi) W^{(n)}(\phi), \quad (3.39)$$

ou, matricialmente,

$$\vec{W}^{(n+1)} = \underline{\underline{P}} \vec{W}^{(n)} . \quad (3.40)$$

Sequências geradas assim são naturalmente chamadas de *cadeias markovianas*⁵ e nos restringiremos a elas no que segue.

Uma condição especial que devemos adicionar a nossa discussão é a *condição forte de ergodicidade* (cadeias markovianas irredutíveis)

$$P(\phi' \leftarrow \phi) > 0 . \quad (3.41)$$

Isto significa que qualquer estado pode ser alcançado a partir de um outro estado inicial em um *único* passo.

Aplicando muitas vezes o processo de atualização em um ensemble inicial é possível que os novos ensembles comecem a pouco diferir entre si; diz-se então que foi alcançado um *ponto fixo* da probabilidade de transição:

$$\underline{\underline{P}}_{pf} \vec{W}_{pf} = \vec{W}_{pf} . \quad (3.42)$$

A densidade do ensemble $\vec{W}_{pf}[\phi']$ é, portanto, um auto-vetor da matriz de transição com auto-valor unitário.

Um tipo muito importante de ensemble de ponto fixo é o *ensemble canônico* $\vec{W}_c[\phi]$ o qual obedece

$$\underline{\underline{P}}_c \vec{W}_c = \vec{W}_c , \quad (3.43)$$

sendo que sua composição é dada pela *distribuição de Maxwell-Boltzmann*

$$\begin{aligned} W_c[\phi] &= \frac{e^{-\beta E[\phi]}}{Z} , \\ Z &= \sum_{[\phi]} e^{-\beta E[\phi]} , \end{aligned} \quad (3.44)$$

onde Z é a *função partição do ensemble canônico*, E é a energia do sistema e $\beta = 1/kT$. Como visto no capítulo 1 todas quantidades termodinâmicas podem ser obtidas a partir da expressão para Z .

Se a probabilidade de transição obedece à *condição de balanço detalhado*

$$P_{pf}(\phi', \phi) W_{pf}(\phi) = P_{pf}(\phi, \phi') W_{pf}(\phi') , \quad (3.45)$$

então (3.42) é automaticamente respeitada, devido à relação (3.38). No caso da distribuição de Maxwell-Boltzmann a condição de balanço detalhado é claramente dada por

$$e^{-\beta E[\phi]} P_c(\phi', \phi) = e^{-\beta E[\phi']} P_c(\phi, \phi') . \quad (3.46)$$

Resumindo, *estamos procurando um tipo especial de matriz de probabilidade de transição* $\underline{\underline{P}}_c[\phi', \phi]$ cujo auto-vetor, de auto-valor unitário, é dado por (3.44), sendo condição suficiente para a construção desta matriz a verificação da condição de balanço detalhado (3.46).

⁵ “O futuro só depende do passado através do presente.” [164]

Como um exemplo, no sistema Is2, a função partição é dada por

$$Z_{Is2} = \sum_{i=1,2,3,4} e^{-\beta E_i} = 2e^{\beta J} + 2e^{-2\beta J} = 4 \cosh(\beta J) , \quad (3.47)$$

a qual leva à seguinte densidade do ensemble canônico:

$$\vec{W}_c = \left(\frac{1}{pZ_{Is2}}, \frac{1}{pZ_{Is2}}, \frac{p}{Z_{Is2}}, \frac{p}{Z_{Is2}} \right). \quad (3.48)$$

com $p = e^{-\beta J}$.

Alguns exemplos de matrizes de probabilidade de transição cujo autovetor é (3.48) são

$$\underline{\underline{P_{c1}}} = \begin{pmatrix} (3 - 2p^2)/4 & 1/4 & 1/4 & 1/4 \\ 1/4 & (3 - 2p^2)/4 & 1/4 & 1/4 \\ p^2/4 & p^2/4 & 1/4 & 1/4 \\ p^2/4 & p^2/4 & 1/4 & 1/4 \end{pmatrix} , \quad (3.49)$$

$$\underline{\underline{P_{c2}}} = \begin{pmatrix} 1/pZ_{Is2} & 1/pZ_{Is2} & 1/pZ_{Is2} & 1/pZ_{Is2} \\ 1/pZ_{Is2} & 1/pZ_{Is2} & 1/pZ_{Is2} & 1/pZ_{Is2} \\ p/Z_{Is2} & p/Z_{Is2} & p/Z_{Is2} & p/Z_{Is2} \\ p/Z_{Is2} & p/Z_{Is2} & p/Z_{Is2} & p/Z_{Is2} \end{pmatrix} . \quad (3.50)$$

Assim, existe muita liberdade na escolha da matriz de probabilidade de transição. Esta escolha caracterizará os diferentes *procedimentos de atualização* dos muitos *algoritmos de simulação* existentes na literatura, alguns dos mais conhecidos sendo os algoritmos de *Metropolis* e *Banho-Térmico*. Antes de discutirmos estes temas vamos considerar o problema das estimativas de erros em simulações e da geração de números aleatórios em computadores.

3.2.3 Estimativa de erro

Erro estatístico

Como vimos, em uma simulação geramos uma cadeia markoviana de configurações

$$\mathcal{S}^N[\phi] = \{\phi^{[1]}, \dots, \phi^{[N]}\} , \quad (3.51)$$

usando métodos estocásticos, com vistas ao cálculo de valores esperados. É claro que estes trazem um erro estatístico que é preciso ser estimado.

As quantidades medidas em uma simulação podem ser classificadas em dois tipos:

- *primárias*, se para cada configuração $\phi^{[i]}$ calculamos a quantidade $A[\phi^{[i]}]$ e depois tomamos a média para obter $\langle A \rangle$. A magnetização no modelo de Ising (1.6) é um exemplo);
- *secundárias*, se a quantidade for função das médias; a susceptibilidade (1.9) é um exemplo.

A distribuição estatística de uma quantidade primária é dada, no caso ideal de configurações não correlacionadas entre si, por uma gaussiana centrada na *média*

$$\langle A \rangle = \frac{1}{N} \sum_i^N A_i \quad (3.52)$$

com *variância*⁶

$$\sigma^2 = \frac{1}{N-1} \langle (A_i - \langle A \rangle)^2 \rangle = \frac{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}{N-1} . \quad (3.53)$$

Notar que o erro decai com $1/\sqrt{N}$.

No entanto, as configurações não são totalmente decorrelacionadas, pois em geral gera-se uma a partir da outra utilizando atualizações locais. A correlação na sequência de configurações pode ser formalmente estimada usando uma *função de autocorrelação* de alguma quantidade medida:

$$\begin{aligned} \chi(\tau) &\equiv \langle A_n A_{n+\tau} \rangle - \langle A_n \rangle \langle A_{n+\tau} \rangle \\ &= \langle A_n A_{n+\tau} \rangle - \langle A_n \rangle^2 \\ &= \langle (A_n - \langle A \rangle)(A_{n+\tau} - \langle A \rangle) \rangle , \end{aligned} \quad (3.54)$$

onde supomos $\langle A_n \rangle = \langle A_{n+\tau} \rangle = \langle A \rangle$. A_n poderia, por exemplo, ser a magnetização por sítio medida na varredura n de Monte Carlo; neste caso, se as medidas m_n e $m_{n+\tau}$ tiverem alguma correlação $\chi(\tau) \neq 0$. Com o aumento da separação entre as medidas (aumento de τ) é de se esperar que a correlação diminua e que, portanto,

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \chi(\tau) = 0 . \quad (3.55)$$

A partir de $\chi(\tau)$ pode-se calcular uma quantidade chamada *tempo de correlação integrado*⁷:

$$\tau_{int} \equiv \frac{1}{2} \sum_{\tau=-\infty}^{\infty} \frac{\chi(\tau)}{\chi(0)} . \quad (3.56)$$

De acordo com [166], o erro é melhor estimado usando esta quantidade:

$$\sigma^2 \equiv \frac{1 + 2\tau_{int}/n_{pulo}}{N-1} (\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2) , \quad (3.57)$$

onde n_{pulo} é o intervalo entre duas medidas guardadas na avaliação de $\langle A \rangle$. Comparando as expressões (3.53) e (3.57) percebemos que devemos tomar como satisfatoriamente decorrelacionadas configurações separadas entre si por

$$n_{pulo} > 2\tau_{int} \quad (3.58)$$

atualizações. Se a condição acima for satisfeita podemos utilizar a expressão (3.53) com segurança.

⁶ O estranho fator $N-1$ em σ vem do fato de que a variância é definida usando $x_i - \mu$, e não $x_i - \bar{x}$ (μ é a média da população inteira); cf. pg. 476 em [165]

⁷ Também chamado de *tempo de correlação* ou de *auto-correlação*.

Como discutido no primeiro capítulo, as teorias relativísticas discretizadas se aproximam do contínuo passando por um ponto crítico onde o comprimento de correlação ξ diverge. Pode-se mostrar que o tempo de correlação está vinculado a ξ através de (seções 3.7.2 e 4.1 em [39])

$$\tau_{int} \propto \xi^z, \quad (3.59)$$

onde z é um *expoente crítico dinâmico*, característico do método de atualização adotado. Métodos locais têm $1 \lesssim z \leq 2$ o que incorre numa perda grave de eficiência próxima ao limite contínuo: este problema é conhecido como *freimento crítico*⁸ do algoritmo. Pode-se combater este problema através de métodos de atualização globais (Fourier acelerado, multigrid, etc) ou, como veremos mais adiante, aperfeiçoando os métodos locais através de técnicas como a sobre-relaxação.

A *análise de erros para quantidades secundárias* é mais delicada, pois estas exigem que já se saiba a média de algum observável da simulação. Seja B uma grandeza função da média de outra quantidade A medida diretamente em uma simulação; a melhor estimativa para B a partir das medidas de A é avaliar a função da média de A e não avaliar B para cada medida de A ; em outras palavras, é melhor usar $B(\bar{A})$ e não $\overline{B(A)}$. Como avaliar o erro de uma grandeza assim? Usamos neste caso técnicas de reamostragem (seção 3.4 em [39]) detalhadas abaixo.

Reamostragem simples (*Binning* ou *Blocking*)

A estratégia mais simples para a estimativa do erro em B é subdividir as N medidas de A em n pequenas amostras. Tiramos a média de A em cada uma destas sub-amostras e avaliamos B para cada uma destas médias. Ficamos portanto com n medidas de B e podemos fazer uso das regras tradicionais de média (3.52) e variância (3.53).

$$\langle B \rangle = \frac{1}{N_{bin}} \sum_i^{N_{bin}} B_i \quad (3.60)$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{N_{bin} - 1} \overline{(B_i - \langle B \rangle)^2}, \quad (3.61)$$

onde $N_{bin} = N/n$. É claro que um n muito pequeno tornaria o erro avaliado muito próximo de $\overline{B(A)}$, o que se quer evitar; por outro lado, com n muito próximo de N teríamos poucos pontos para avaliação confiável do erro. O que se faz é procurar um valor de N_{bin} para o qual o erro não seja muito diferente do erro com $2N_{bin}$. Não é um método rigoroso; no entanto, as médias das sub-amostras, se tomadas como medidas em si, ajudam a reduzir a correlação.

Reamostragem sequencial (*Jackknife*)

Pode-se gerar novas médias a partir da mesma amostra de N medidas *independentes* usando a estratégia de *reamostragem sequencial* [167–169] na qual se fazem novas médias de A tirando uma das medidas da amostra por vez:

$$\bar{A}^{(a)} = \frac{1}{N-1} \sum_{b \neq a} A_b, \quad a = 1, 2, \dots, N. \quad (3.62)$$

⁸ *Critical slowing down*

Este procedimento gera, é claro, N novas médias e sobre cada uma pode-se calcular $B(\bar{A}^{(a)})$ cuja média é

$$\bar{B}_{jack} = \frac{1}{N} \sum_{a=1}^N B(\bar{A}^{(a)}) \quad (3.63)$$

e variância

$$\sigma_{jack}^2 = \frac{N-1}{N} \sum_{a=1}^N (B(\bar{A}^{(a)}) - \bar{B}_{jack})^2. \quad (3.64)$$

Para o caso de quantidades primárias, (3.64) é igual a (3.53).

Reamostragem aleatória (*Bootstrap*)

Esta técnica [170] é similar a de cima, mas podem ser feitas tantas reamostragens quanto se queira. A partir da amostra total original de N medidas independentes de A são geradas N_b novas amostras de mesmo tamanho N seguindo o seguinte procedimento: *i*) escolhamos aleatoriamente uma medida da amostra original e a guardamos; *ii*) repete-se o passo anterior por N vezes, permitindo-se que a mesma medida possa ser escolhida várias vezes ou até mesmo omitida.

A média de cada nova amostra nesta *reamostragem aleatória* é dada então por

$$\bar{A}_b = \frac{1}{N} \sum_{a=1}^N A_a^b, \quad b = 1, 2, \dots, N_b. \quad (3.65)$$

A média de uma grandeza secundária fica

$$\bar{B}_{boot} = \frac{1}{N_b} \sum_{b=1}^{N_b} B(\bar{A}_b) \quad (3.66)$$

e sua variância

$$\begin{aligned} \sigma_{boot}^2 &= \frac{1}{N_b} \sum_{b=1}^{N_b} (B(\bar{A}_b) - \bar{B}_{boot})^2 \\ &= \langle B^2 \rangle - \langle B \rangle^2. \end{aligned} \quad (3.67)$$

Escolher entre a reamostragem sequencial ou aleatória depende do número de medidas que se tem. Um erro razoável para a aleatória demanda pelo menos 100 reamostragens; assim, se o número de medidas é menor que 100 escolhe-se a reamostragem sequencial, pois teremos que fazer menos reamostragens. Se for maior, escolhe-se a aleatória [39].

Erros sistemáticos

A maioria dos assim chamados erros sistemáticos são decorrentes de simplificações no modelo físico utilizado como, em nosso caso, discretização e volume finito. Além disso, existem erros vindos de expectativas estatísticas do algoritmo: por exemplo, espera-se que o algoritmo de atualização leve a configuração inicial (quente, fria, etc) para a configuração de equilíbrio, a partir de onde a medida de observáveis faz sentido. Esta sequência de atualizações iniciais da

rede é chamada de *termalização* e pode-se mostrar que um observável alcança a configuração de equilíbrio (*relaxa*) através de um decaimento exponencial

$$e^{-t/\tau_{rel}} ; \quad (3.68)$$

τ_{rel} é chamado *tempo de relaxação* da grandeza medida.

Pode-se assumir que o ensemble de equilíbrio foi atingido comparando-se duas simulações que tiveram diferentes configurações iniciais: quando o observável nas duas simulações oscila em torno do mesmo valor, conclue-se que foi *esquecida* a configuração inicial.

3.2.4 Geradores de números aleatórios (GNA)

“Anyone who considers arithmetical methods of producing random digits is, of course, in a state of sin.”

John von Neumann (1951)

“ Anyone who has not seen the above quotation in at least 100 places is probably not very old.”

D. V. Pryor (1993)

As análises das seções anteriores contam *a priori* com a existência de geradores de números aleatórios. É claro que isto é um assunto um tanto bizarro quando se trata de usar um dispositivo determinístico como um computador para conseguir estes números. Por isso, os geradores de números aleatórios costumam ser classificados em três tipos:

- *Número verdadeiramente aleatórios*: são produzidos a partir de algum fenômeno físico aleatório como, por exemplo, o decaimento radioativo (os cliques de um contador Geiger serviriam para este propósito). Os números são gravados em dispositivos como fitas magnéticas ou discos compactos para posterior leitura e uso, procedimento um tanto lento para utilização em simulações. No entanto, servem bem para a verificação da qualidade de sequências de números aleatórios gerados deterministicamente (ver abaixo).
- *Números pseudo-aleatórios*: são gerados via algum algoritmo numérico determinístico, mas são distribuídos de tal modo a parecerem tão aleatórios quanto as sequências do item acima. São os geradores usados na maioria das simulações e o *único* tipo usado neste trabalho.
- *Números quase-aleatórios*: também são gerados através de algoritmos numéricos, com a diferença de que não precisam possuir todas as propriedades dos números aleatórios, mas apenas algumas específicas à distribuição desejada. Não é adequado para todos os tipos de simulação.

No que segue usaremos indistintamente os termos aleatório e pseudo-aleatório.

É interessante enfatizar as propriedades que um GNA deve ter. De acordo com [171] um bom GNA possui:

1. *Boa distribuição*: ou seja, a sequência deve ter boa aleatoriedade e passar nos testes existentes (teste espectral, DIEHARD, verificação de modelos solúveis, etc);
2. *Período longo*: após um certo número de sorteios (*período*), as saídas do GNA começarão a se repetir. Em uma aplicação com uso pesado de números aleatórios é importante que o período seja bastante grande. Atualmente existem geradores com período de até $2^{19937} - 1$ [172].
3. *Reprodutibilidade*: por motivos práticos espera-se que um GNA reproduza toda sequência por ele gerada se a mesma semente for utilizada. Isto é feito com vistas à verificação de erros em programas que usam o GNA.
4. *Longas sequência independentes*: em simulações paralelas (ou seriais, mas em máquinas diferentes) são usadas sequências de números aleatórios gerados por um mesmo GNA; portanto, deve-se tomar muito cuidado para que as sequências sejam estatisticamente independentes. Esclarecemos como fizemos isso mais abaixo.
5. *Portabilidade*: computacionalmente isto em geral significa que o algoritmo deve poder ser escrito eficientemente em alguma linguagem de programação de alto nível como Fortran. Para GNA, no entanto, isto também quer dizer que a sequência obtida em uma máquina seja igual a produzida em outra diferente se as condições iniciais forem as mesmas.
6. *Eficiência*: isto é, claro, muito importante; no entanto, deve se lembrar que, em geral, a mera chamada das sub-rotinas dos GNA leva mais tempo que a própria geração dos números.

Os tipos de algoritmos mais comuns de GNA são: *método congruente linear multiplicativo*⁹ [173], *sequências espaçadas de Fibonacci*¹⁰ e *Tausworthe* ou *rerranjo de registro*¹¹ [37, 171]. Técnicas de melhoramento da aleatoriedade podem ser aplicadas a todos estes algoritmos [37]. Em nosso trabalho utilizamos apenas o algoritmo *RANLUX*, uma extensão do algoritmo de Marsaglia e Zaman (RCARRY) [174] feita por Lüscher [175].

Algoritmo RANLUX

O algoritmo RCARRY é do tipo sequência espaçada de Fibonacci:

$$x_n = (x_{n-r} \pm x_{n-s} \pm c) \bmod b \quad (3.69)$$

onde r e s são os espaçamentos ($r > s$) e c é um bit auxiliar. Os r valores anteriores de x_n devem ser guardados. Todos os parâmetros, r , s e b , são escolhidos de modo a proporcionar o maior período possível. Para $b = 2^{24}$, a escolha é $r = 24$ e $s = 10$, o que dá um período aproximadamente igual a 10^{171} . O estado do gerador pode ser recuperado guardando os valores dos $r = 24$ últimos inteiros, mais dois números inteiros curtos e um

⁹ *Multiplicative linear congruential.*

¹⁰ *Lagged Fibonacci sequences.*

¹¹ *Shift register.*

bit, informação que pode ser colocada em um vetor de 25 componentes de precisão simples. A inicialização é feita fornecendo um único número inteiro (a *semente*) que gerará este vetor de 25 componentes o qual dará origem a uma *longa sequência disjunta*. É importantíssima esta propriedade: o algoritmo RCARRY pode ser assim utilizado em simulações paralelas ou concorrentes, já que dois números inteiros diferentes em dois processadores distintos irão fornecer sequências de números aleatórios descorrelacionadas.

O problema encontrado no algoritmo RCARRY é que, por ser um gerador linear multiplicativo congruente disfarçado [176], possui uma estrutura de hiperplanos na distribuição de seus números [177].

Lüscher interpreta o algoritmo RCARRY em termos de um sistema dinâmico e descobre padrões caóticos; propõe então que se joguem fora números da sequência gerada por RCARRY em intervalos $(p - 24)$ maiores que o “tempo de correlação” do sistema. Quanto maior este intervalo, melhor será a qualidade da nova sequência gerada com a sugestão de Luscher. O algoritmo assim modificado foi chamado de RANLUX, pois nele pode-se definir o *grau de satisfação*¹² da aleatoriedade:

- nível 0, $p = 24$, corresponde a RCARRY;
- nível 1, $p = 48$, ainda não passa no teste espectral;
- nível 2, $p = 97$, passa todos os testes, mas ainda contém correlações;
- nível 3, $p = 223$, valor padrão, excelentes propriedades estatísticas.
- nível 4, $p = 389$, máximo grau de aleatoriedade, não faz sentido aumentar p além deste valor. Todos os 24 bits da mantissa são caóticos.

Até onde sabemos não foi encontrado nenhum tipo de padrão nos números gerados por RANLUX quando o grau de satisfação é maior igual a 3.

Especificamente nesta tese foi utilizada uma versão de dupla-precisão distribuída pelo próprio autor do algoritmo. Nela existem apenas os três níveis de satisfação de espaçamentos $p = 109$, $p = 202$ e $p = 397$ (correspondentes aos níveis 2, 3 e 4 acima). *Sempre utilizamos o grau máximo de satisfação.*

3.3 Métodos de Atualização

Como explicado na seção anterior, grande parte do trabalho numa simulação Monte Carlo é gasto na atualização das configurações. No caso específico das teorias de calibre na rede se trata de atualizar os elos $U_\mu(x)$. Para um caso simples de uma rede 10×10 teríamos aproximadamente 100 elos a sortear para depois avaliar a ação total e comparar com a ação antiga, e então decidir se aceitamos ou não a nova configuração. Este tipo de atualização classificada como *global* é muito custosa computacionalmente e a abordagem mais utilizada é a atualização *local*. Neste tipo de processo atualiza-se um elo por vez e verifica-se como o pequeno pedaço da ação que dele depende se comporta. Fazendo isto em todos os elos da

¹² *Luxury*.

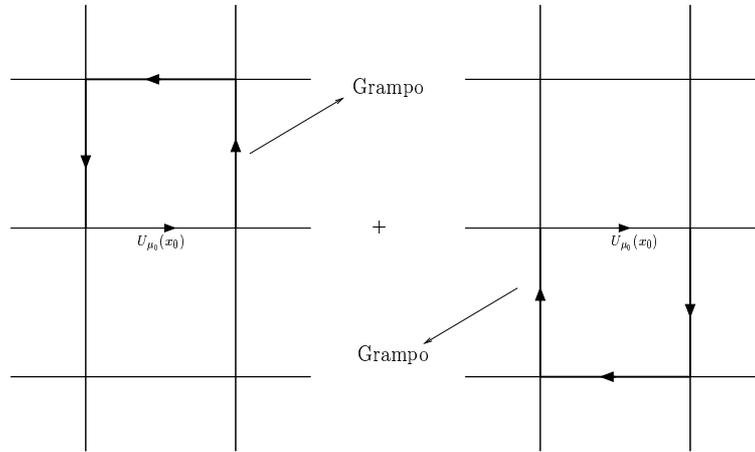


Fig. 3.4: Atualização local de um elo.

rede obtém-se uma atualização com menos gastos computacionais (pelo menos quando se está longe do regime crítico).

Como mostrado no apêndice B.6 a ação de Wilson (1.48) pode ser reescrita como

$$S_W[U_\mu(x)] = -\frac{\beta}{N} \text{Re}[\text{Tr}(U_{\mu_0}(x_0) s_{\mu_0}(x_0))] + \dots \quad (3.70)$$

com

$$s_{\mu_0}(x_0) = \sum_{\nu \neq \mu_0} [\Sigma_{\mu_0\nu}^{(+)}(x_0) + \Sigma_{\mu_0\nu}^{(-)}(x_0)] \quad (3.71)$$

e

$$\Sigma_{\mu_0\nu}^{(+)}(x_0) = U_\nu(x_0 + \hat{\mu}_0) U_{\mu_0}^\dagger(x_0 + \hat{\nu}) U_\nu^\dagger(x_0), \quad (3.72)$$

$$\Sigma_{\mu_0\nu}^{(-)}(x_0) = U_\nu^\dagger(x_0 - \hat{\nu} + \hat{\mu}_0) U_{\mu_0}^\dagger(x_0 - \hat{\nu}) U_\nu(x_0 - \hat{\nu}). \quad (3.73)$$

No primeiro termo em (3.70) estão contidos todos termos da ação de Wilson que dependem do elo $U_{\mu_0}(x_0)$; assim, quando atualizarmos este elo e quisermos saber do impacto da mudança na ação basta avaliar este termo. As quantidades $\Sigma_{\mu_0\nu}(x_0)$ são conhecidas como *grampos*¹³, nome que se compreende quando olhamos para figura 3.4

Passamos a detalhar os diversos modos de efetuar a atualização local: o método utilizado nesta tese é o Banho-Térmico, mas por complementação também apresentamos o (mais conhecido) algoritmo de Metropolis.

3.3.1 Algoritmo de Metropolis

O algoritmo de Metropolis [178] é uma sequência de passos para aceitar ou rejeitar uma configuração tentativa no processo de atualização. Sua matriz de probabilidade de transição

¹³ *Staples*.

para um sistema com \mathfrak{N} diferentes estados é dada por

$$P(\phi' \leftarrow \phi) = \mathfrak{N}^{-1} \min\{1, R\}, \quad (3.74)$$

$$R = \frac{W_c(\phi')}{W_c(\phi)}. \quad (3.75)$$

Para clarificar o significado da fórmula acima vamos aplicá-la ao sistema Is2. Suponhamos que começamos com $\phi = 1$ e tentamos uma atualização para $\phi' = 3$

$$P(3, 1) = \frac{1}{4} \min\{1, W_c(3)/W_c(1)\} = \frac{1}{4} \min\{1, p^2\} = \frac{p^2}{4}. \quad (3.76)$$

Esse procedimento é aplicado a todos os elementos da matriz de probabilidade de transição. De fato, a matriz (3.49) é a matriz de probabilidade de transição do sistema Is2 usando o algoritmo de Metropolis.

Como isto é implementado na prática em um programa de computador? É só seguir os seguintes passos:

1. Comece com uma configuração inicial arbitrária $\phi^{[0]}$. (Pode-se ter um *início frio*¹⁴ se fixarmos as variáveis do estado inicial em um valor específico, um *início quente*¹⁵ se os valores destas variáveis são escolhidos aleatoriamente, ou ainda um início a partir de uma configuração armazenada.)
2. Escolha aleatoriamente um novo estado ϕ^{teste} do conjunto $\{1, 2, 3, 4\}$;
3. Calcule $W_c(\phi^{[0]})$ e $W_c(\phi^{teste})$:
 - (a) Se $W_c(\phi^{teste}) \geq W_c(\phi^{[0]})$, então guarde a configuração teste $\phi^{teste} \rightarrow \phi^{[0]}$, incremente i e faça $\phi^{[i]} = \phi^{teste}$;
 - (b) Se $W_c(\phi^{teste}) < W_c(\phi^{[0]})$, então sorteie um número aleatório $\xi \in (0, 1]$:
 - i. Se $\xi < W_c(\phi^{teste})/W_c(\phi^{[0]})$, então guarde a configuração teste $\phi^{teste} \rightarrow \phi^{[0]}$, incremente i e faça $\phi^{[i]} = \phi^{teste}$;
 - ii. Se $\xi > W_c(\phi^{teste})/W_c(\phi^{[0]})$, então descarte a configuração de teste, incremente i e faça $\phi^{[i]} = \phi^{[0]}$;
4. Vá para passo 2.

Repita este algoritmo tantas vezes quantas forem o número de configurações desejadas para produzir a amostra:

$$S_N = \{\phi^{[1]}, \phi^{[2]}, \dots, \phi^{[N]}\}. \quad (3.77)$$

Desta amostra pode-se obter uma estimativa para uma integral como (3.28) já que as configurações em S_N estão distribuídas de acordo com (3.44). No sistema Is2 isto seria

$$\sum_{\phi=1,2,3,4} f(\phi)p(\phi) \sim \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N f(\phi^{[\alpha]}), \text{ com } \phi^{[\alpha]} \in S_N. \quad (3.78)$$

¹⁴ *Cold start*

¹⁵ *Hot start*

Ergodicidade

Como dito acima, ergodicidade garante que qualquer estado do sistema pode ser alcançado depois de um único passo da atualização, independentemente do estado em que o sistema se encontrava. Isto em geral não é um problema simples. A estratégia geral [22, 39, 40] é construir uma atualização ergódica a partir de atualizações intermediárias não-ergódicas:

$$\underline{P}_i \geq 0, \quad (3.79)$$

$$\underline{P} = \prod_i \underline{P}_i. \quad (3.80)$$

Assume-se que esta composição de pequenos passos não-ergódicos pode aproximar uma atualização ergódica, ou seja,

$$\underline{P} > 0. \quad (3.81)$$

Atualização local

Aqui formalizamos o conceito de atualização local. Até agora vimos representando uma configuração das variáveis que definem o sistema por ϕ (*e.g.*, $\phi = 1 = \uparrow\downarrow$). Interessamos agora introduzir um índice que especifique cada uma das variáveis da configuração; por exemplo $1_2 = \downarrow$, pois se refere a variável 2 da configuração 1. Assim também nos referiremos à variável x na configuração ϕ por ϕ_x ; as demais variáveis desta mesma configuração serão denotadas por $\phi_{\check{x}}$.

A distribuição canônica é então escrita como

$$W_c(\phi) \equiv W_c(\phi_x; \phi_{\check{x}}) \equiv \widetilde{W}_c(\phi_x; \phi_{\check{x}}) \check{W}_c(\phi_{\check{x}}), \quad (3.82)$$

onde isolamos a parte da distribuição canônica que não depende de ϕ_x ($\check{W}_c(\phi_{\check{x}})$); similarmente a probabilidade de transição do sistema inteiro na atualização local da variável x será dada então por

$$P_x(\phi' \leftarrow \phi) = P_x(\phi'_x \leftarrow \phi_x; \phi_{\check{x}}) \delta(\phi'_{\check{x}} - \phi_{\check{x}}), \quad (3.83)$$

onde $P_x(\phi'_x \leftarrow \phi_x; \phi_{\check{x}})$ é a probabilidade condicional de transição de x , mantendo as demais variáveis inalteradas. Estando considerando apenas a mudança da variável x , esta atualização é claramente não-ergódica. Assume-se que a atualização local $P_x(\phi' \leftarrow \phi)$ obedeça a uma *condição local de balanço detalhado*

$$P_x(\phi'_x \leftarrow \phi_x; \phi_{\check{x}}) \widetilde{W}_c(\phi_x; \phi_{\check{x}}) = P_x(\phi_x \leftarrow \phi'_x; \phi_{\check{x}}) \widetilde{W}_c(\phi'_x; \phi_{\check{x}}) \quad (3.84)$$

e uma *ergodicidade local*

$$P_x(\phi'_x \leftarrow \phi_x; \phi_{\check{x}}) > 0. \quad (3.85)$$

Para obter a ergodicidade global fazemos esta atualização local em todas as variáveis do sistema (uma *varredura*):

$$P(\phi' \leftarrow \phi) = \prod_x P_x(\phi' \leftarrow \phi). \quad (3.86)$$

3.3.2 Banho Térmico

Entramos agora no principal método de atualização utilizado em nossas simulações. Como já mencionado, basicamente ele identifica a densidade do ensemble canônico com a matriz de probabilidade de transição:

$$P(\phi' \leftarrow \phi) \equiv W_c(\phi') = \frac{e^{-S[\phi']}}{Z} . \quad (3.87)$$

Da expressão acima já se observa a principal característica deste método de atualização: ele independe da configuração antiga (não aparece ϕ no lado direito da expressão para $P(\phi' \leftarrow \phi)$). Isto melhora a ergodicidade, mas é muito dispendioso. Naturalmente aderimos a uma atualização local, onde cada elo é atualizado por vez, independente de seu valor antigo, mas dependendo do valor dos grampos; de fato, é apenas sob este ponto de vista local que podemos nos referir ao algoritmo de Banho-Térmico, pois o nome vem da analogia com a termodinâmica, mas aqui temos na verdade um “banho de elos”.

Ilustremos no caso do modelo de Ising com N sítios. A probabilidade de transição no algoritmo de banho-térmico é dada por

$$P(s' \leftarrow s) \equiv \frac{e^{-\beta E_{ising}[s']}}{Z} , \quad (3.88)$$

onde

$$Z = \sum_{[s]} e^{-\beta E_{ising}[s]} . \quad (3.89)$$

Dado um sítio específico i , podemos sempre escrever

$$E_{ising}[s] = \tilde{E}[s_i] + \check{E}_{ising}[\{\check{s}\}, s_i \notin \{\check{s}\}] , \quad (3.90)$$

com

$$\tilde{E}[s_i] = -J s(i) c(i) , \quad (3.91)$$

$$c(i) = \sum_{\mu=1}^{d=2} (s(\vec{i} + \hat{\mu}) + s(\vec{i} - \hat{\mu})) . \quad (3.92)$$

Assim, $P(s' \leftarrow s)$ pode ser reescrita como

$$P(s' \leftarrow s) = \prod_i^N P_i(s'_i \leftarrow s_i; \check{s}) , \quad (3.93)$$

onde

$$P_i(s'_i \leftarrow s_i; \check{s}) = \alpha e^{-\beta \tilde{E}[s_i]} ; \quad (3.94)$$

α é uma constante de normalização. Para um dado sítio temos, é claro, apenas duas possibilidades de atualização, \uparrow ou \downarrow :

$$P_i(\uparrow \leftarrow s_i; \check{s}) + P_i(\downarrow \leftarrow s_i; \check{s}) = 1 , \quad (3.95)$$

$$P_i(\uparrow \leftarrow s_i; \check{s}) = \alpha e^{-\beta \tilde{E}_{\uparrow i}} , \quad (3.96)$$

$$P_i(\downarrow \leftarrow s_i; \check{s}) = \alpha e^{\beta \tilde{E}_{\uparrow i}} , \quad (3.97)$$

onde usamos que no modelo de Ising $\tilde{E}_{\downarrow i} = -\tilde{E}_{\uparrow i}$. Das equações acima é fácil tirar que

$$\alpha = \frac{1}{e^{-\beta\tilde{E}_{\uparrow i}}(1 + e^{2\beta\tilde{E}_{\uparrow i}})} \quad (3.98)$$

e, portanto,

$$P_i(\uparrow \leftarrow s_i; \check{s}) = \frac{1}{(1 + e^{2\beta\tilde{E}_{\uparrow i}})}, \quad (3.99)$$

$$P_i(\downarrow \leftarrow s_i; \check{s}) = \frac{e^{2\beta\tilde{E}_{\uparrow i}}}{(1 + e^{2\beta\tilde{E}_{\uparrow i}})}. \quad (3.100)$$

Na prática, sorteia-se um número $\xi \in (0, 1]$ e se $\xi \leq P_i(\uparrow \leftarrow s_i; \check{s})$, o novo spin é \uparrow , do contrário é \downarrow .

3.3.3 Sorteio de matrizes $SU(2)$

Tendo ilustrado o algoritmo de Banho-Térmico para o caso mais simples das variáveis de spin do modelo de Ising, passemos agora ao tipo de graus de liberdade necessários a esta tese. A partir de (3.70) e (3.87) vemos que o problema é gerar matrizes $SU(2)$ com uma distribuição

$$P(h)dh \propto \exp\left(\frac{\beta}{2}\text{Re}[\text{Tr}(\Sigma h)]\right)dh, \quad (3.101)$$

onde Σ é uma matriz complexa 2×2 ,

$$\Sigma = \Sigma_0 \mathbb{1} + i \vec{\Sigma} \cdot \vec{\sigma}, \quad (3.102)$$

formada pela soma de matrizes $SU(2)$, e h é uma matriz $SU(2)$ ¹⁶. Projetando Σ em $SU(2)$ (ver (B.7)):

$$\Sigma = \xi \tilde{\Sigma}, \quad (3.103)$$

$$\xi \equiv \sqrt{\Sigma_0^2 + |\vec{\Sigma}|^2}, \quad (3.104)$$

temos que (3.101) se transforma em

$$P(h)dh \propto \exp\left(\frac{\beta\xi}{2}\text{Re}[\text{Tr}(\tilde{\Sigma}h)]\right)dh. \quad (3.105)$$

Usando a invariância da medida de Haar podemos fazer a troca de variáveis $a = \tilde{\Sigma}h$, onde a é parametrizada como usual ($a = a_0 \mathbb{1} + i \vec{a} \cdot \vec{\sigma}$). Temos então

$$P(a)da \propto \exp\left(\frac{\beta\xi}{2}\text{Re}[\text{Tr}(a)]\right)da, \quad (3.106)$$

$$\propto e^{\beta\xi a_0} da. \quad (3.107)$$

¹⁶ Claramente temos as associações $h \rightarrow U_{\mu_0}(x_0)$ e $\Sigma \rightarrow s_{\mu_0}(x_0)$.

Falta explicitar a medida de Haar:

$$da = \delta(1 - a_0^2 + |\vec{a}|^2) da_0 d^3 a_i , \quad (3.108)$$

o que, em coordenadas polares fica

$$da = da_0 r^2 \sin(\theta) dr d\theta d\phi \delta(1 - a_0^2 - r^2); \quad (3.109)$$

usando

$$\begin{aligned} \delta(1 - a_0^2 - r^2) r^2 dr &\doteq \frac{r^2}{2\sqrt{1 - a_0^2}} [\delta(r - (1 - a_0^2)^{1/2}) + \delta(r + (1 - a_0^2)^{1/2})] dr , \\ &\doteq \sqrt{1 - a_0^2} \delta(r - (1 - a_0^2)^{1/2}) dr , \end{aligned} \quad (3.110)$$

temos

$$da = (1 - a_0^2)^{1/2} da_0 \sin(\theta) dr d\theta d\phi \delta(r - (1 - a_0^2)^{1/2}) . \quad (3.111)$$

Portanto, precisamos gerar uma distribuição para a_0 de acordo com

$$P(a_0) da_0 \propto (1 - a_0^2)^{1/2} e^{\beta \xi a_0} da_0 \quad (3.112)$$

e gerar a_i distribuídos uniformemente numa esfera de raio $r = (1 - a_0^2)^{1/2}$ usando

$$a_1 = r \sin(\theta) \cos(\phi) , \quad (3.113)$$

$$a_2 = r \sin(\theta) \sin(\phi) , \quad (3.114)$$

$$a_3 = r \cos(\theta) . \quad (3.115)$$

A parte mais complexa é a geração de a_0 ; passada esta etapa podemos calcular a_1, a_2 e a_3 seguindo os seguintes passos:

1. geram-se dois números aleatórios uniformes $\chi, \xi \in (0, 1]$;
2. a partir deles calculam-se dois números distribuídos uniformemente nos intervalos $[-1, 1]$ e $[0, 2\pi]$

$$u = 2\chi - 1 , \quad (3.116)$$

$$\theta = 2\pi\xi ; \quad (3.117)$$

3. Calculamos a_3 :

$$a_3 = \sqrt{1 - a_0^2} u \quad (3.118)$$

4. Calculamos a_1 e a_2 reexpressando-os em termos de a_3 :

$$a_1 = [(1 - a_0^2) - a_3^2] \cos(\theta) \quad (3.119)$$

$$a_2 = [(1 - a_0^2) - a_3^2] \sin(\theta) . \quad (3.120)$$

Passamos a descrever os dois métodos utilizados neste trabalho para a geração de a_0 : método de Creutz e o de Kennedy/Pendleton.

Método 1 (Creutz [179])

Este algoritmo serve para calcular integrais do tipo

$$\int_{-1}^{+1} f(a_0)(1 - a_0^2)^{1/2} e^{\alpha a_0} da_0 \quad (3.121)$$

usando o método Monte Carlo. Como já usamos a distribuição exponencial como exemplo do método da transformação inversa, e $(1 - a_0^2)^{1/2}$ para ilustrar o aceita-rejeita, vamos só enumerar os passos que levam a avaliação de (3.121):

1. Gerar um número $\xi \in (0,1]$;
2. $d = (e^\alpha - e^{-\alpha})\xi + e^{-\alpha}$
3. $y = \ln(d)/\alpha$
4. Gerar um número $\theta \in (0,1]$
5. Se $\theta \leq (1 - y^2)^{1/2}$, então guarde y . Do contrário, descarte y e volte para o passo 1.
6. Incremente i e faça $a_0^{(i)} = y$. Volte para o passo 1.

Repete-se o procedimento acima até que sejam gerados N números. O valor de (3.121) fica aproximado por

$$\int_{-1}^{+1} f(a_0)(1 - a_0^2)^{1/2} e^{\alpha a_0} da_0 \sim \frac{\mathfrak{N}^{-1}}{N} \sum_{i=1, \dots, N} f(a_0^{(i)}), \quad (3.122)$$

onde

$$\mathfrak{N} = \pi/\alpha I_1(\alpha) \quad (3.123)$$

é a constante de normalização desta distribuição de a_0 .

Método 2 (Kennedy e Pendleton [180])

Os cálculos que levam à avaliação de (3.121) pelo método de Kennedy e Pendleton são detalhados na seção (B.8). Este método constitui-se dos seguintes passos:

1. Gerar quatro números aleatórios $c_1, c_2, c_3, c_4 \in (0,1]$;
2. Identificar $x = -\ln(c_1)/\alpha$, $x' = -\ln(c_2)/\alpha$ e $w = \cos^2(2\pi c_3)$;
3. $v = x w$
4. $\bar{\delta} = \sqrt{x' + v}$
5. Se $c_4^2 \leq (1 - \bar{\delta}^2/2)$, então guarde $\bar{\delta}$, do contrário, descarte $\bar{\delta}$ e volte para o passo 1.
6. Incremente i e faça $a_0^{(i)} = 1 - \bar{\delta}^2$. Volte para o passo 1.

Como no algoritmo de Creutz repete-se o procedimento até que sejam gerados a quantidade de números desejada.

Pode-se mostrar que a probabilidade de aceitação no método de Creutz é melhor que a de Kennedy-Pendleton para pequenos valores de α ; no caso oposto, Kennedy-Pendleton tem desempenho melhor. Por isso seguimos a sugestão de [181] optando por escolher entre o método 1 ou 2 dependendo do valor de α : para $\alpha < \alpha_{cutoff}$ usa-se Creutz, do contrário usa-se Kennedy-Pendleton. Em nossas simulações foi usado $\alpha_{cutoff} = 2$.

3.3.4 Sobre-relaxação

Uma técnica conhecida de resolver equações de diferença finita é chamada *sobre-relaxação*. Seus conceitos foram estendidos às teorias de calibre $SU(N)$ por Adler e Creutz [182, 183]. A estratégia básica é escolher uma configuração teste o mais longe possível da antiga configuração de modo a ajudar a varrer o espaço das configurações mais efetivamente.

Para $SU(N)$ joga-se um elo teste $U'_l (\equiv U_{\mu_0}(x_0))$ para longe do antigo, U_l , através de

$$U'_l = U_0 U_l^{-1} U_0, \quad (3.124)$$

forma que verifica trivialmente o balanço detalhado.

Para $SU(2)$ escolhe-se o inverso da projeção da matriz de grampos¹⁷ $s_l (\equiv s_{\mu_0}(x_0))$ neste grupo (ver (B.7)):

$$U_0 = [\text{Pr}(s_l)]^{-1} = s_l^{-1} \det(s_l)^{1/2}. \quad (3.125)$$

Usando que

$$\text{Tr}[V^{-1}] = \text{Tr}[V], \quad V \in SU(2), \quad (3.126)$$

podemos mostrar que

$$\text{Tr}(U'_l s_l) = \text{Tr}(U_l s_l). \quad (3.127)$$

Substituindo (3.125) em (3.124) obtém-se

$$U'_l = \text{Tr}(U s_l) \frac{s_l^\dagger}{\det(s_l)} - U, \quad (3.128)$$

onde usamos (3.126) e

$$V = \text{Tr}(V)\mathbb{1} - V^\dagger, \quad V \in SU(2). \quad (3.129)$$

A identidade (3.127) diz que a nova configuração não muda o valor da ação: é não ergódica, pois mantém as configurações numa hipersuperfície de mesma energia (mesmo valor de ação), daí esta atualização também ser chamada de *microcanônica*. Assim, precisamos alternar com ela uma atualização ergódica, como Metropolis ou Banho-Térmico. À esta mescla de algoritmos ergódicos e não-ergódicos se dá o nome de *Sobre-relaxação Híbrida*¹⁸.

¹⁷ Equivalentemente, a projeção do inverso da matriz de grampos.

¹⁸ *Hybrid Overrelaxation*

3.4 Métodos de minimização

Até agora preocupamo-nos com métodos de atualização para gerar configurações de elos distribuídos de acordo com o peso de Boltzmann. Tendo cumprido este passo ainda é necessário fixar o calibre se quisermos calcular o propagador do glúon.

Como explicado no capítulo 2, a fixação do calibre na rede se faz através da minimização do funcional da expressão (2.85) que abaixo repetimos por conveniência:

$$\mathcal{E}_U[g] \equiv 1 - \frac{1}{dV} \sum_{\mu=1}^d \sum_x \frac{\text{Tr}}{2} [g(x) U_\mu(x) g^\dagger(x + e_\mu)] . \quad (3.130)$$

Dada uma das configurações geradas $\{U_\mu(x)\}$ precisamos achar uma configuração $\{g(x)\}$ que seja um mínimo de $\mathcal{E}_U[g]$.

Vários algoritmos podem ser utilizados nesta busca: *Los Alamos* [184,185], *Cornell* [186], *Sobre-relaxação* [144], *Sobre-relaxação Estocástica* [185], *Transformada rápida de Fourier*¹⁹ [186], *Grades múltiplas*²⁰ [187,188], etc, os dois últimos sendo de natureza global.

Nesta tese utilizamos o método de sobre-relaxação estocástica, pois tem se mostrado eficiente no combate ao freiamto crítico. Utilizamos também em algumas configurações o método de Cornell, para avaliar a importância do algoritmo na escolha do mínimo local (que equivale a uma cópia de Gribov).

Em acordo com as referências [189] e [190], nas quais podem ser encontrados mais detalhes sobre os algoritmos de minimização, tratamos de diferenciar os algoritmos apenas através de uma matriz de atualização R_{at} , definida mais abaixo.

Seguindo passos similares aos mostrados na seção B.6, obtém-se que o funcional (3.130) pode ser reescrito como

$$\mathcal{E}_U[g] \equiv -\frac{a^d}{2dV} \text{Tr} w(x_0) + \dots \quad (3.131)$$

onde as reticências referem-se a termos que não dependem do sítio x_0 e

$$w(x_0) \equiv g(x_0)h(x_0) , \quad (3.132)$$

$$h(x_0) \equiv \sum_{\mu=1}^d [U_\mu(x_0)g^\dagger(x_0 + \hat{\mu}) + U_\mu^\dagger(x_0 - \hat{\mu})g^\dagger(x_0 - \hat{\mu})] . \quad (3.133)$$

Assim como os elos dependem dos grampos ao seu redor, as variáveis $g(x_0)$ dependem das cruces $h(x_0)$ (figura 3.5).

Por serem somas de matrizes $SU(2)$, as matrizes $h(x_0)$ e $w(x_0)$ podem ser escritas como múltiplas das suas projeções neste grupo

$$h(x_0) \equiv \sqrt{\det h(x_0)} \tilde{h}(x_0) , \quad (3.134)$$

$$w(x_0) \equiv \sqrt{\det w(x_0)} \tilde{w}(x_0) . \quad (3.135)$$

Como $w(x_0) = g(x_0)h(x_0)$, temos $\det(w(x_0)) = \det(h(x_0))$, sendo então útil introduzir a notação

$$\mathcal{N}(x_0) \equiv \sqrt{\det w(x_0)} = \sqrt{\det h(x_0)} \quad (3.136)$$

¹⁹ *Fast Fourier Transform.*

²⁰ *Multigrid methods.*

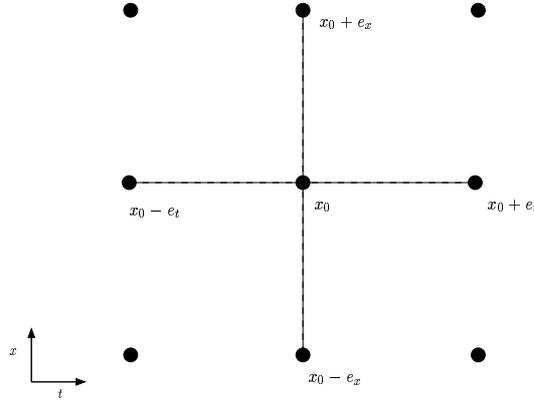


Fig. 3.5: *Cruzes para atualização das variáveis $g(x_0)$.*

e também

$$\mathcal{T}(x_0) \equiv \text{Tr}(\tilde{w}(x_0)) . \quad (3.137)$$

Definindo a matriz de atualização através de

$$g'(x_0) \equiv R_{at}(x_0)g(x_0) \quad (3.138)$$

é fácil ver que a variação no funcional \mathcal{E} será dada por

$$\begin{aligned} \Delta\mathcal{E}(x_0) &= \frac{a^d \mathcal{N}(x_0)}{2dV} \text{Tr}\{[g(x_0) - g'(x_0)] \tilde{h}(x_0)\} \\ &= \frac{a^d \mathcal{N}(x_0)}{2dV} \text{Tr}\{[1 - R_{at}(x_0)] \tilde{w}(x_0)\} . \end{aligned} \quad (3.139)$$

3.4.1 Método da sobre-relaxação estocástica

Investiguemos o traço que aparece em (3.139):

$$\text{Tr}[(1 - R_{at})\tilde{w}] = 2\tilde{w}_0 - \text{Tr}[R_{at}\tilde{w}] . \quad (3.140)$$

Definindo $S_{at}^\dagger = R_{at}$ podemos escrever

$$\text{Tr}[R_{at}\tilde{w}] = \text{Tr}[\tilde{w}S_{at}^\dagger] = 2(\tilde{w}_0 S_{at,0} + \tilde{w}_1 S_{at,1} + \tilde{w}_2 S_{at,2} + \tilde{w}_3 S_{at,3}) \equiv 2 \cos(\alpha) , \quad (3.141)$$

onde interpretamos o traço como um produto escalar entre vetores. Como queremos que o traço em (3.140) seja o mais negativo possível, (3.141) deve ser o maior possível, ou seja $\cos(\alpha) = 1$ o que só é possível se $S_{at} = \tilde{w}$ ou

$$R_{at} = \tilde{w}^\dagger . \quad (3.142)$$

A atualização simples

$$g'_{i.a.}(x_0) = \tilde{w}^\dagger g(x_0) \quad (3.143)$$

é conhecida como *método de Los Alamos*.

Como mencionado mais acima, métodos de *relaxação* são muito utilizados na resolução de equações diferenciais [37], onde o sistema começa num dado estado teste e *relaxa* (converge) para a solução através da aplicação de procedimentos iterativos (métodos de Jacobi ou Gauss-Seidel, por exemplo) em imensos sistemas lineares. Uma extensão da relaxação chama-se *sobre-relaxação*, às vezes também referida como *sobre-relaxação sucessiva*²¹: nela, a correção a uma solução tentativa do sistema linear proveniente da relaxação (digamos, Δx) é substituída por $\omega \Delta x$: pode haver uma *sobre-correção* ($1 < \omega \leq 2$) ou uma *sub-correção* ($0 < \omega < 1$). Apenas neste intervalo, $0 < \omega \leq 2$, o procedimento converge, e apenas para a sobre-correção ou sobre-relaxação obtém-se convergência mais rápida que a de Gauss-Seidel ($\omega = 1$).

No presente caso, a idéia acima é aplicada (sobre-) corrigindo-se a matriz de atualização de Los Alamos:

$$g'(x_0) = \tilde{w}^{\dagger \omega} g(x_0). \quad (3.144)$$

Para $\omega = 1$ recuperamos o método de Los Alamos e para $\omega = 2$ é imediato de (3.139) que o funcional \mathcal{E} não se altera. O significado de uma potência não inteira de uma matriz $SU(2)$ é conseguido usando a expansão binomial [144, 189]. A atualização acima é, portanto, conhecida como *método da sobre-relaxação*.

Finalmente, chegamos ao *método da sobre-relaxação estocástica* o qual mescla probabilisticamente atualizações tipo Los Alamos e tipo sobre-relaxação com $\omega = 2$:

$$g'(x_0) = \begin{cases} [\tilde{w}^{\dagger}(x_0)]^2 g(x_0) & \text{com probabilidade } p \\ \tilde{w}^{\dagger}(x_0) g(x_0) & \text{com probabilidade } 1 - p \end{cases}. \quad (3.145)$$

O espírito de algoritmo é alternar grandes mudanças nas configurações, mesmo sem alterar \mathcal{E} , com grandes descidas em \mathcal{E} proporcionadas pelo método de Los Alamos. É o mesmo espírito do algoritmo de Sobre-relaxação Híbrida.

3.4.2 Método de Cornell

Esperamos que o divergente do campo de calibre vá sistematicamente a zero com o uso dos métodos de minimização. Assim, à medida que nos aproximamos da configuração das variáveis $g(x)$ que minimizam o funcional \mathcal{E} , estamos nos aproximando de $\nabla \cdot \hat{\mathbf{A}} = 0$, sugerindo uma matriz de atualização do tipo

$$R_{at}(x_0) \equiv \exp[-\alpha a^2 g_0(\nabla \cdot \hat{\mathbf{A}}^{(g)})(x_0)]. \quad (3.146)$$

Esta pode ser expandida como

$$R_{at}(x_0) \propto [1 - \alpha a^2 g_0(\nabla \cdot \hat{\mathbf{A}}^{(g)})(x_0)], \quad (3.147)$$

a qual precisa ainda ser reunitarizada. Verificando que

$$w(x_0) = w^{\dagger}(x_0) + 2 a^2 g_0 \left(\nabla \cdot \hat{\mathbf{A}}^{(g)} \right) (x_0) \quad (3.148)$$

²¹ *Successive overrelaxation*

e usando (3.129) chegamos à forma final da matriz de atualização de Cornell:

$$g'(x_0) = \frac{\alpha \mathcal{N}(x_0) \tilde{w}^\dagger(x_0) + [1 - \alpha \mathcal{N}(x_0) \mathcal{T}(x_0)/2] \mathbb{1}}{\sqrt{1 + \alpha^2 \mathcal{N}^2(x_0) [1 - \mathcal{T}^2(x_0)/4]}} g(x_0), \quad (3.149)$$

onde α é um parâmetro a ser sintonizado para melhor desempenho.

3.5 Paralelização

*“There are only 10 different kinds of people in the world:
those who know binary and those who don’t.”*

Anônimo

“Weeks of programming can save you hours of planning.”

Anônimo

O objetivo deste trabalho é a investigação do comportamento infravermelho do propagador do glúon, o que só pode ser feito através do estudo de redes de grandes volumes; como mencionado no capítulo 2, o menor momento não nulo é proporcional a L^{-1} . O problema destes grandes volumes não é só o tempo de processamento necessário, mas também a memória utilizada. Para se ter uma idéia, vejamos quanta memória apenas os elos de uma rede 140^3 precisariam:

$$U_\mu(x) \rightarrow \underbrace{3}_{\text{componentes Lorentz}} \times \underbrace{4}_{\text{componentes } SU(2)} \times \underbrace{140^3}_{\text{Volume}} \times \underbrace{8}_{\text{bytes p.d.}} \sim 250 \text{ Mbytes} \quad (3.150)$$

E isto apenas para uma das matrizes do programa, existem outras auxiliares de tamanho parecido e mais as variáveis de spin $g(x)$. Temos portanto um problema de memória. Este obstáculo pode ser resolvido dividindo a rede total entre p processadores/memórias diferentes através da *paralelização*.

Dependendo do problema, se diz que o método de Monte Carlo é *embaraçosamente paralelizável*; esta facilidade no entanto não se refere ao presente caso, pois não podemos realizar vários processos seriais em diferentes processadores e apenas depois tomar a média; a rede é grande demais para que uma única configuração seja gerada em um processador.

3.5.1 Pilha de pc's

Atualmente o modo mais econômico de obter grande poder computacional é empilhando computadores pessoais e colocando-os em comunicação. De fato, mesmo computadores pessoais comprados em lojas de departamentos podem ser empilhados para formar um supercomputador de vários Gigaflops (~ 200 Gflops, por exemplo em [191]). No momento da escrita desta tese o computador mais rápido encontrado em supermercados (Pentium IV, 2.8 GHz) pode sozinho alcançar $\sim 1,5$ Gflops (5 Gflops de pico teórico), de acordo com os recordes de velocidade registrados no último relatório LINPACK [192, 193]. Empilhando vários destes pode-se chegar até os Teraflops; uma das mais recentes adições é o MCR

(*Multiprogrammatic Capability Cluster*) com 1.152 nós, cada um contendo 2 processadores Pentium IV 2.4GHz, totalizando 7.2 Teraflops.

A pilha de PC's utilizada nas simulações deste trabalho foi montado no IFSC-USP: é constituído de 16 nós de processadores Pentium III 866 MHz com 256 Mb de memória RAM; o servidor possui o mesmo processador, mas com o dobro da memória RAM. As máquinas são conectadas através de cabos *Fast-Ethernet* 100 Mbps full-duplex e um chaveador (*switch*) de 24 entradas. O equipamento está esquematizado na figura 3.6.

A abordagem mais utilizada para usufruir das capacidades de computação paralela destas pilhas de PC's é o da *troca de mensagens* entre os nós, como o PVM (*Parallel Virtual Machine*) e o MPI (*Message Passing Interface*), usado neste trabalho.

3.5.2 Paralelizando com MPI

Utilizamos a biblioteca MPI para as instruções de paralelização por esta estar mais difundida e portanto melhor documentada. Utilizamos a implementação²² MPICH, apesar de que nenhuma alteração (como era de se esperar!) se observou utilizando a implementação LAM.

A idéia do MPI é dividir a tarefa em p processos, processos estes rodados, em geral, em processadores diferentes, os quais se intercomunicam via troca de mensagens.

Todo programa MPI contém no mínimo a estrutura:

```
1     include 'mpif.h'
2     ...
3     call MPI_Init(ierr)
4     call MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, my_rank, ierr)
5     call MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, p, ierr)
6     ... (grosso do programa)
7     call MPI_Finalize(ierr)
8     ...
9     end
```

sendo que toda instrução de troca de mensagens vem entre as linhas 5 e 7. Duas das instruções mais utilizadas são, é claro, `MPI_Send` e `MPI_Recv`. Este programa estará rodando em todos os processadores e cada um saberá o que deverá fazer através de sua identificação, a variável `my_rank`.

Suponhamos que a tarefa seja contar o número de letras do hino nacional brasileiro e que tenhamos 10 computadores à disposição em nossa pilha. A estratégia é enviar duas estrofes para cada nó e mandá-los contar o número de letras, para que depois retornem o resultado para o servidor; este somará os resultados obtidos e poderemos saber quantas letras compõem as vinte estrofes do hino.

Isto é a que se refere como uma tarefa embarçosamente paralelizável; no caso de uma rede de spins pequena, poderíamos querer gerar 1000 configurações para obter a média de Monte Carlo: para tanto bastaria enviar ao processador 1 a tarefa de gerar as configurações de 1 a 100; ao processador 2, gerar de 101 a 200, e assim sucessivamente. Uma tarefa bastante trivial para o MPI:

²² Implementações de MPI são apenas formas diferentes de se inicializar o multicomputador, gerenciar os processos e fazer o programa com MPI acessar esta biblioteca. O programa em si não muda.

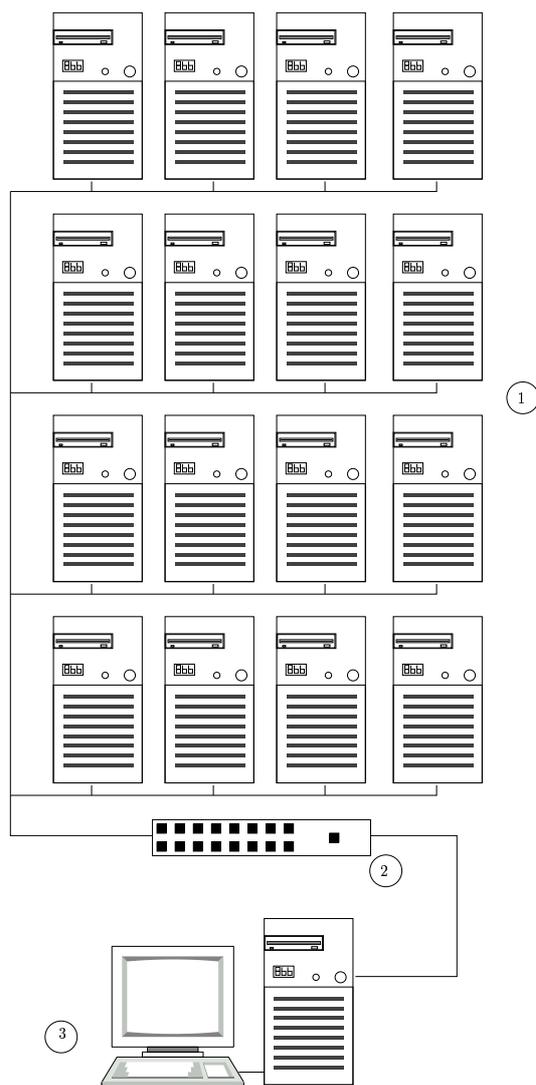


Fig. 3.6: *Pilha de PC's do IFSC-USP. 1 - Nós/escravos da pilha; 2 - Chaveador (switch); 3 - Servidor/Mestre*

```
01      do i=1,10
02          if(my_rank.eq.i) then
03              j = (i-1)*100+1
04              call monte_carlo(v(j))
05              call MPI_Send(v(j), 100, MPI_FLOAT,
06  &                          0, tag, MPI_COMM_WORLD, ierr)
07
08          endif
09      enddo
10      if(my_rank.eq.0) then
11          do i=1,10
12              j = (i-1)*100+1
13              call MPI_Recv(v(j), 100, MPI_FLOAT,
14  &                          i, tag, MPI_COMM_WORLD, ierr)
15          enddo
16          s=0.
17          do i=1,1000
18              s = s + v(i)
19          enddo
20          vmedio = s/1000.
21      endif
22      ...
```

Nas linhas 5-6 são enviados 100 valores do processador `my_rank` para o servidor 0; nas linhas 13-14 o servidor recebe os valores enviados pelos vários nós.

No entanto, nesta tese, devido à grande demanda de memória, estamos querendo dividir a rede em sub-redes, surgindo um problema nas bordas: algumas variáveis dependem de variáveis que estão em outras sub-redes, ou seja, em outros nós. Retomando a analogia no hino nacional seria como, se por alguma confusão tipográfica, nos tivesse sido entregue um texto onde o último verso é o primeiro, o primeiro é o segundo, o segundo é o terceiro, e assim até que o penúltimo acaba sendo o último. No entanto, continuamos querendo que o processador 1 nos dê o total de letras das 2 primeiras estrofes, que o processador 2 nos dê o total de letras da 3ª e 4ª estrofes, e assim sucessivamente. Assim, precisamos fazer uma comunicação entre os nós: enviamos a primeira linha do processador 1 para o processador 10, a primeira linha de 2 para 1,... Só então procedemos à contagem. Torna-se clara a necessidade de um mecanismo de comunicação entre os nós, o que é feito através de uma central chaveadora (*switch*).

GNA paralelo

Numa computação serial na qual se utilizam números aleatórios, a maior preocupação é de que estes não estejam correlacionados; bons GNA nos garantem isso. Um problema extra que aparece numa computação em paralelo é a possibilidade de que sequências de números aleatórios geradas em diferentes processadores possam estar correlacionadas. Como saber se em dado momento a sequência do processador 3 não começa a repetir a sequência do processador 6?

Como explicado na seção sobre números aleatórios, o algoritmo de Marsaglia nos garante que sequências disjuntas serão geradas para 2^{31} valores de números inteiros; assim, basta escolher um número diferente para cada processador. Em nosso trabalho, utilizamos como semente um número função da identificação do processador, ou seja, função da variável `my_rank`.

3.5.3 Construção dos grampos e cruzes

O procedimento para identificação dos sítios e elos, e da construção de grampos segue [194, 195].

Seja uma rede hipercúbica de lados N_μ ($1 \leq \mu \leq d$) com os sítios identificados por coordenadas $x = (x_1, x_2, \dots, x_d)$ ($0 \leq x_\mu \leq N_\mu - 1$), e volume total $\prod_{\mu=1}^d N_\mu$. Introduzimos um *endereço global* do sítio através de

$$J(x) = 1 + x_1 + \sum_{\mu=2}^d x_\mu \prod_{k=1}^{\mu-1} N_k \quad (3.151)$$

(*e.g.*, numa rede de lado 4×8 , $J((1, 2)) = 1 + 1 + 2 \times 4 = 10$).

Com vistas à paralelização é interessante considerar uma classificação dos sítios em pares e ímpares, distribuídos como num tabuleiro de xadrez (figura 3.7). A vantagem deste procedimento está no fato de que na atualização de sítos pares, precisamos apenas da informação sobre os sítos ímpares, o que facilita a vetorização. Ademais possibilita a transmissão de muitos dados ao mesmo tempo, reduzindo o tempo de latência. Desta forma, passaremos a classificar um sítio de par (ímpar) se a soma $\sum_{\mu=1}^d x_\mu$ for par (ímpar).

Dividimos a rede entre p processadores: se cada processador for responsável por $n = \prod_{\mu}^d m_\mu$ sítios, teremos

$$p = \prod_{\mu}^d M_\mu, \quad (3.152)$$

onde

$$M_\mu = N_\mu / m_\mu. \quad (3.153)$$

Para manter o ordenamento par/ímpar é necessário que n seja um número par. Fica claro das definições que se $M_\mu \neq 1$ a direção μ estará dividida em diferentes processadores.

Discutamos agora as classificações dentro de um processador \mathcal{P} (os processadores vizinhos serão referidos como $\mathcal{P} \pm \mu$): em cada uma dessas sub-redes temos $V \equiv n/2$ sítios pares ou ímpares e podemos aferir um *endereço local*, j , a cada um dos sítios, obedecendo a regra expressa em (3.151). Da mesma forma, definimos *endereços locais de paridade específica* l .

Podemos estender a idéia de paridade aos elos: $U_\mu(x_0)$ poderá ser reexpresso unicamente em \mathcal{P} pela sua paridade e endereço local

$$U_\mu(x_0) = \begin{cases} E_\mu(l) & (x_0 \text{ é sítio par}) \\ O_\mu(l) & (x_0 \text{ é sítio ímpar}) \end{cases}, \quad (3.154)$$

Outra quantidade importante é o *vetor de vizinhos*: $v_e(l, \mu)$ lista os endereços locais dos vizinhos do sítio l na direção μ (segue similarmente a definição para $v_o(l, \mu)$). É claro que

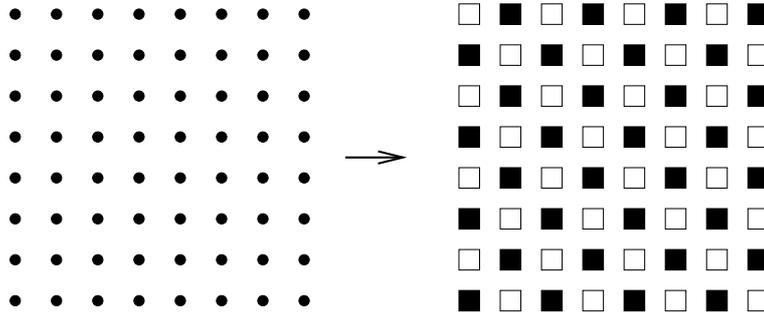


Fig. 3.7: Divisão da rede em sítios pares (■) e ímpares(□) (tabuleiro de xadrez).

se, por exemplo, a direção μ estiver dividida, os vetors de vizinhos deverão ter a informação dos endereços dos vizinhos no processador $\mathcal{P} + \mu$. Assim, o número de componentes deve ser estendida de $V + 1$ para $V + V/m_\mu$; dizemos que V/m_μ é o número de *sítios problemáticos* na fronteira $\mathcal{P}/\mathcal{P} + \mu$. Esta abordagem corresponde à tradicional técnica de área estendida usada, por exemplo, na resolução exata do modelo de Ising em $2D$ [196]. As quantidades acima estão exemplificadas na figura 3.8 para uma rede 2×8 .

Grampos $\Sigma_{\mu_0\nu}^{(+)}(x_0)$

Analisando a expressão para este grampo

$$\Sigma_{\mu_0\nu}^{(+)}(x_0) = U_\nu(x_0 + \hat{\mu}_0)U_{\mu_0}^\dagger(x_0 + \hat{\nu})U_\nu^\dagger(x_0) \tag{3.155}$$

percebemos que teremos que tomar cuidado com a direção μ_0 e ν , já que o grampo depende de elos em $x_0 + \hat{\mu}_0$ e $x_0 + \hat{\nu}$, ou seja, se uma dessas direções estiver dividida entre diferentes processadores os sítios problemáticos precisarão de informação de elos de processadores vizinhos o que exigirá troca de mensagens.

Definimos uma matriz temporária T de acordo com

$$T \equiv U_{\mu_0}^\dagger(x_0 + \hat{\nu})U_\nu^\dagger(x_0), \tag{3.156}$$

para depois construir o grampo com

$$\Sigma_{\mu_0\nu}^{(+)}(x_0) = U_\nu(x_0 + \hat{\mu}_0)T. \tag{3.157}$$

Em direções divididas, precisamos dos seguintes passos: *separar e preparar* os elos a serem trocados entre processadores, *enviar* os elos para o processador vizinho e dele *receber* os elos de que precisar. No programa todos estes passos são realizados numa única sub-rotina denominada **SETLINK**.

É claro que ela poderá ser utilizada tanto no caso de (3.156) quanto de (3.157).

Grampos $\Sigma_{\mu_0\nu}^{(-)}(x_0)$

O caso deste grampo é um pouco mais complicado; de

$$\Sigma_{\mu_0\nu}^{(-)}(x_0) = U_\nu^\dagger(x_0 - \hat{\nu} + \hat{\mu}_0)U_{\mu_0}^\dagger(x_0 - \hat{\nu})U_\nu(x_0 - \hat{\nu}) \tag{3.158}$$

vemos que os sítios problemáticos poderiam precisar de elos de até 2 processadores vizinhos. O truque utilizado é temporariamente utilizar como sítios base $x_0 - \hat{\nu}$ e construir $\Sigma_{\mu\nu}^{(-)}(x_0 - \hat{\nu})$ para só então deslocar o grampo calculado na direção ν e obter (3.158). Os passos são bastante similares aos do grampo positivo, com exceção do deslocamento da matriz que exige uma comunicação diferente. Todos estes passos são colocados em uma única sub-rotina, `SLIDEMATRIX`.

Cruzes

A construção das cruzes

$$h(x_0) \equiv \sum_{\mu=1}^d [U_{\mu}(x_0)g^{\dagger}(x_0 + \hat{\mu}) + U_{\mu}^{\dagger}(x_0 - \hat{\mu})g^{\dagger}(x_0 - \hat{\mu})] . \quad (3.159)$$

possui as mesmas dificuldades dos grampos e, portanto, pode ser aplicada a mesma solução. Para o primeiro termo entre colchetes utilizamos a rotina `SETLINK` e para o segundo termo usamos `SLIDEMATRIX`.

3.6 Sumário dos passos

Nesta seção esquematizamos os passos gerais a serem seguidos até a obtenção de uma configuração de elos com calibre fixado:

1. Iniciar com uma configuração de elos (quente, fria, guardada);
2. Termalizar (relaxar) a rede até que alcance a configuração de equilíbrio;
3. Salvar uma configuração a cada $n_{pulo} > 2\tau$ geradas;
4. Com cada configuração pode-se calcular já valores de grandezas invariantes de calibre (a plaqueta, por exemplo);
5. Para o propagador do glúon é necessário fixar o calibre; dada $\{U_{\mu}(x)\}$ achar $\{g(x)\}$ que minimize o funcional \mathcal{E} usando um dos métodos de minimização descritos.
6. Com a configuração fixada utilizam-se as fórmulas do propagador do glúon apresentadas no capítulo 2.

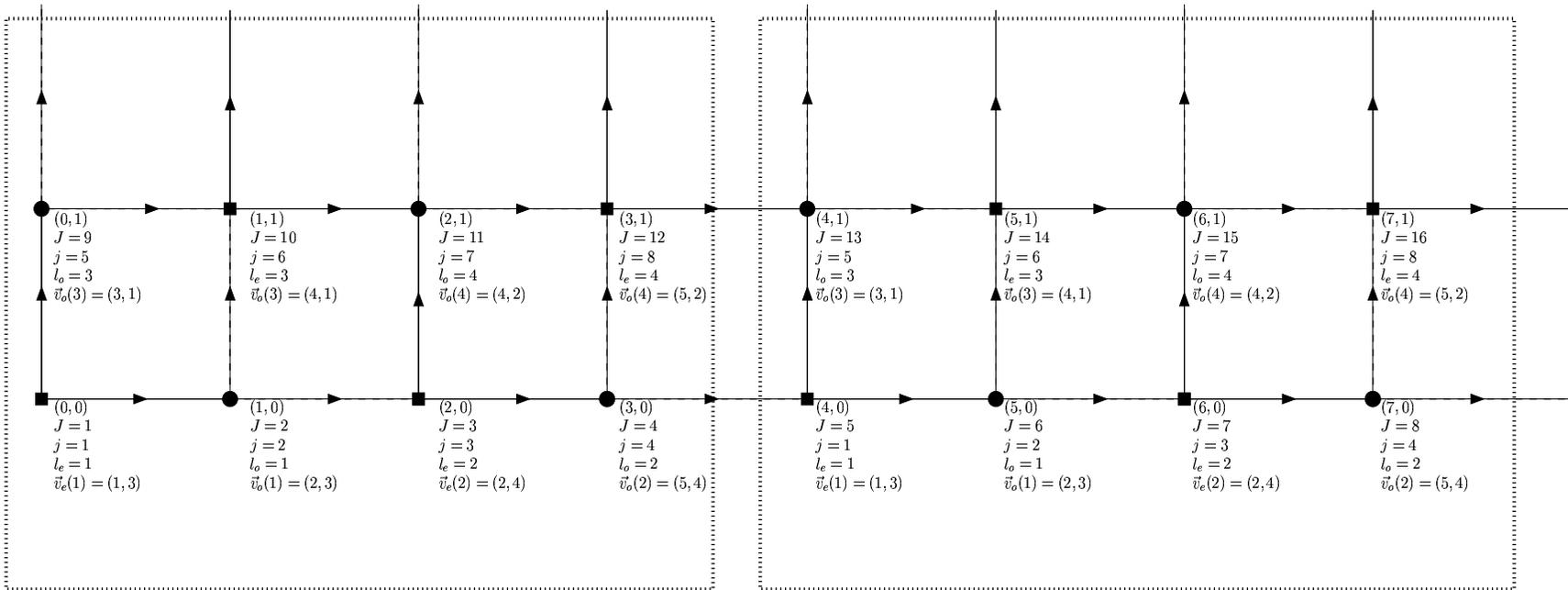


Fig. 3.8: Identificação dos sítios.

Capítulo 4

Resultados

4.1 Introdução

Aplicando os métodos de simulação introduzidos no capítulo anterior ao problema do propagador do glúon na rede euclidiana, discutido no capítulo 2, podemos obter resultados numéricos com erros bastante satisfatórios e compará-los com algumas das previsões analíticas apresentadas.

Neste capítulo, apresentamos os resultados de simulações do propagador do glúon em YM_3^2 no calibre de Landau para 4 espaçamentos de rede diferentes ($\beta = 3.0, 4.2, 5.0, 6.0$) em redes de volume pequeno ($V = 8^3, 16^3, 32^3$) e grande ($V = 40^3, 80^3, 140^3$). Nossa análise dos dados enfatiza a influência da discretização e do volume finito na forma do propagador. Isto reflete os dois principais limites que queremos atingir para podermos comparar os resultados da rede às teorias contínuas: o limite de volume infinito e o limite do contínuo.

Fazemos ajustes de nossos resultados com formas analíticas discutidas no capítulo 2 e outras aqui sugeridas. Fazemos isto utilizando o grupo de redes $\beta = 4.2, 5.0, 6.0$ e $V = 40^3, 80^3, 140^3$, por estarem mais próximas da região de escalamento¹. A partir dos melhores ajustes fazemos o contato com o problema do confinamento no cenário de Gribov-Zwanziger/Kugo-Ojima. Também investigamos a função de Schwinger em busca de possível violação de positividade.

Na última seção relatamos os dados referentes ao desempenho da pilha de pc's e dos algoritmos nela utilizados.

4.2 Resultados das simulações

A configuração inicial de elos é sempre aleatória e para termalização usamos o algoritmo de sobre-relaxação híbrida (HOR). Como descrito no capítulo 3, cada iteração HOR consiste de uma varredura de banho térmico (ergódica) seguida de m varreduras microcanônicas (não-ergódicas). Usamos $m = 4$ para as todas as redes, à exceção da rede de 140^3 , onde $m = 5$. Para otimizar o Banho-Térmico implementamos os dois métodos de geração de matrizes $SU(2)$ descritos na seção 3.3.3 [181] com $\alpha_{cutoff} = 2$. Na tabela 4.1 apresentamos, para cada acoplamento β e volume da rede V , os parâmetros usados para as simulações nas redes grandes. Nas redes pequenas ($V = 8^3, 16^3, 32^3$) usamos sempre 3000 varreduras de termalização para gerar 200 configurações, com 300 varreduras entre duas configurações

¹ São as redes utilizadas no artigo [34].

β	V	Configurações	Termalização	Varreduras	p_{sor}
3.0	40^3	400	1100	100	0.70
3.0	80^3	200	2200	200	0.80
3.0	140^3	30	2750	250	0.88
4.2	40^3	400	1100	100	0.70
4.2	80^3	200	2200	200	0.80
4.2	140^3	30	2750	250	0.88
5.0	40^3	400	1320	120	0.69
5.0	80^3	200	2420	220	0.80
5.0	140^3	30	3080	280	0.88
6.0	40^3	400	1540	140	0.68
6.0	80^3	200	2680	240	0.80
6.0	140^3	30	3300	300	0.87

Tab. 4.1: Pares (β, V) considerados nas simulações de redes grandes e os respectivos número de configurações, número de varreduras HOR para termalização e entre duas configurações válidas, e o parâmetro p_{sor} usado no algoritmo SOR.

válidas (não tentamos encontrar o melhor parâmetro p_{sor} para cada rede, usamos $p_{sor} = 0.66$ para todas essas redes pequenas). Rodamos as redes 40^3 em um nó único, as redes 80^3 em dois nós e as redes 140^3 em quatro nós.

Para cada valor de β nas redes grandes avaliamos o valor médio da plaqueta, $\langle W_{1,1} \rangle$, (ver tabela 4.2), útil na avaliação do espaçamento da rede e no tempo de auto-correlação. Também obtivemos o acoplamento com correção de diagramas tipo girino,

$$\beta_I \equiv \beta \langle W_{1,1} \rangle . \quad (4.1)$$

Podemos assim aproveitar o ajuste dado pela eq. 2 da referência [75],

$$\beta_I \sqrt{\sigma} = c_0 + \frac{c_1}{\beta_I}, \quad (4.2)$$

onde, de acordo com a tabela IV desta referência,

$$c_0 = 1.3405(31) \quad \text{e} \quad c_1 = -0.417(24) , \quad (4.3)$$

e calcular a tensão da corda em unidades de rede. A partir do valor $\sqrt{\sigma} = 0.44$ GeV podemos calcular o espaçamento da rede a e colocar todas as grandezas em unidades físicas (ver tabelas 4.2 e 4.3). Os erros provêm da propagação de erros². O ajuste é válido

² Dada uma função $u = f(x, y, z)$ a propagação dos erros das medidas de x, y, z (variáveis por hipótese descorrelacionadas) até u é dada através de

$$\sigma_u = \sqrt{\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 \sigma_x^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)^2 \sigma_y^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)^2 \sigma_z^2},$$

com as derivadas sendo avaliadas em \bar{x}, \bar{y} e \bar{z} .

β	$\langle W_{1,1} \rangle$	$\sqrt{\hat{\sigma}}$	a^{-1} (GeV)	p_{min} (MeV)		
				40^3	80^3	140^3
3.0	0.62399(7)	0.597(7)	0.737(9)	115.6(10)	57.9(5)	33.1(3)
4.2	0.741861(2)	0.387(3)	1.136(8)	178.3(14)	89.2(7)	51.0(4)
5.0	0.786869(2)	0.314(2)	1.402(8)	220.0(18)	110.1(9)	62.9(4)
6.0	0.824780(1)	0.254(1)	1.733(8)	271.9(22)	136.1(11)	77.8(4)

Tab. 4.2: Para cada β apresentamos o valor médio da plaqueta, a tensão da corda $\sqrt{\hat{\sigma}}$, o inverso do espaçamento da rede em GeV e o menor momentum não-nulo em MeV.

para $\beta \gtrsim 3.0$, *i.e.* para os acoplamentos β considerados nos ajustes ($\beta \geq 4.2$) estamos seguramente bastante acima do regime de acoplamento forte (mais próximos da região de escalamento).

Para a fixação numérica de calibre usamos o algoritmo de sobre-relaxação estocástica (SOR) com atualização par/ímpar. Na tabela 4.1 está mostrado o parâmetro p_{sor} usado para cada par (β, V) das redes grandes. Consideramos o calibre fixado quando o valor médio de $[(\nabla \cdot \hat{A})^b(x)]^2$, eq. (2.86), é menor que 10^{-12} .

Para metade das configurações da rede $V = 80^3$ foi usada a fixação numérica de calibre via método de Cornell com parâmetros $\alpha_{corn} = 0.325, 0.32, 0.316$ para $\beta = 4.2, 5.0, 6.0$, respectivamente. De fato, o método de Cornell é um pouco mais rápido que o algoritmo SOR, com qualidade de fixação parecida se usamos a atualização par/ímpar. Encontramos para $\beta = 4.2$ que a razão entre o valor final e inicial da soma das cargas Σ_Q , eq. (2.87), está (em 95% dos casos) em torno de 5.3×10^{-10} no método de Cornell e 2.4×10^{-11} no algoritmo SOR. O tempo médio de CPU necessário para atualizar cada sítio é aproximadamente 11% menor para o método de Cornell.

Em qualquer um dos casos, o tempo de CPU necessário para a fixação do calibre foi muito significativo para as redes grandes. Para redes ainda maiores que 140^3 provavelmente será necessária a implementação de algum algoritmo global de atualização.

Nas figuras 4.1, 4.2, 4.3 e 4.4 graficamos o propagador do glúon adimensional para $\beta = 3.0, 4.2, 5.0$ e 6.0 , respectivamente. Em cada figura pode se verificar a mudança na forma do propagador com o aumento do volume. Comparando gráficos identificados pela mesma letra nestas figuras observa-se esta mudança para diminuição da discretização (β crescente).

β	a (fm)	Volume físico da rede ($\times 1000 \text{ fm}^3$)		
		40^3	80^3	140^3
3.0	0.2678(32)	1.23(4)	9.8(4)	52.7(2)
4.2	0.174(1)	0.337(6)	2.6(5)	14.4(2)
5.0	0.1407(8)	0.178(3)	1.43(2)	7.6(1)
6.0	0.1138(5)	0.094(1)	0.75(1)	4.04(5)

Tab. 4.3: Para cada β apresentamos o espaçamento da rede em fm e o volume físico da rede em fm^3 .

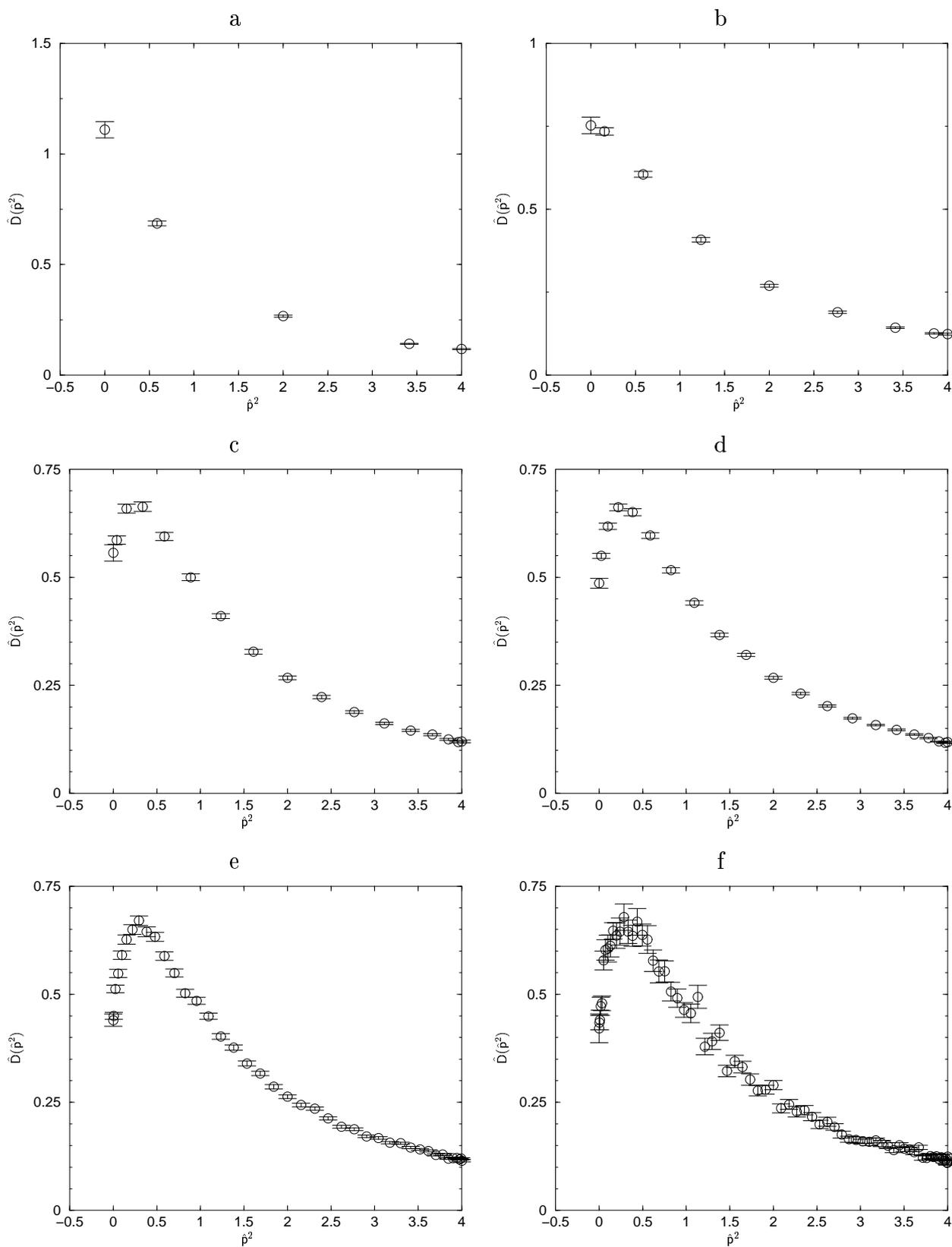


Fig. 4.1: $\hat{D}(\hat{\rho}^2) \times \hat{\rho}^2$ para $\beta = 3.0$. a) 8^3 , b) 16^3 , c) 32^3 , d) 40^3 , e) 80^3 , f) 140^3 .

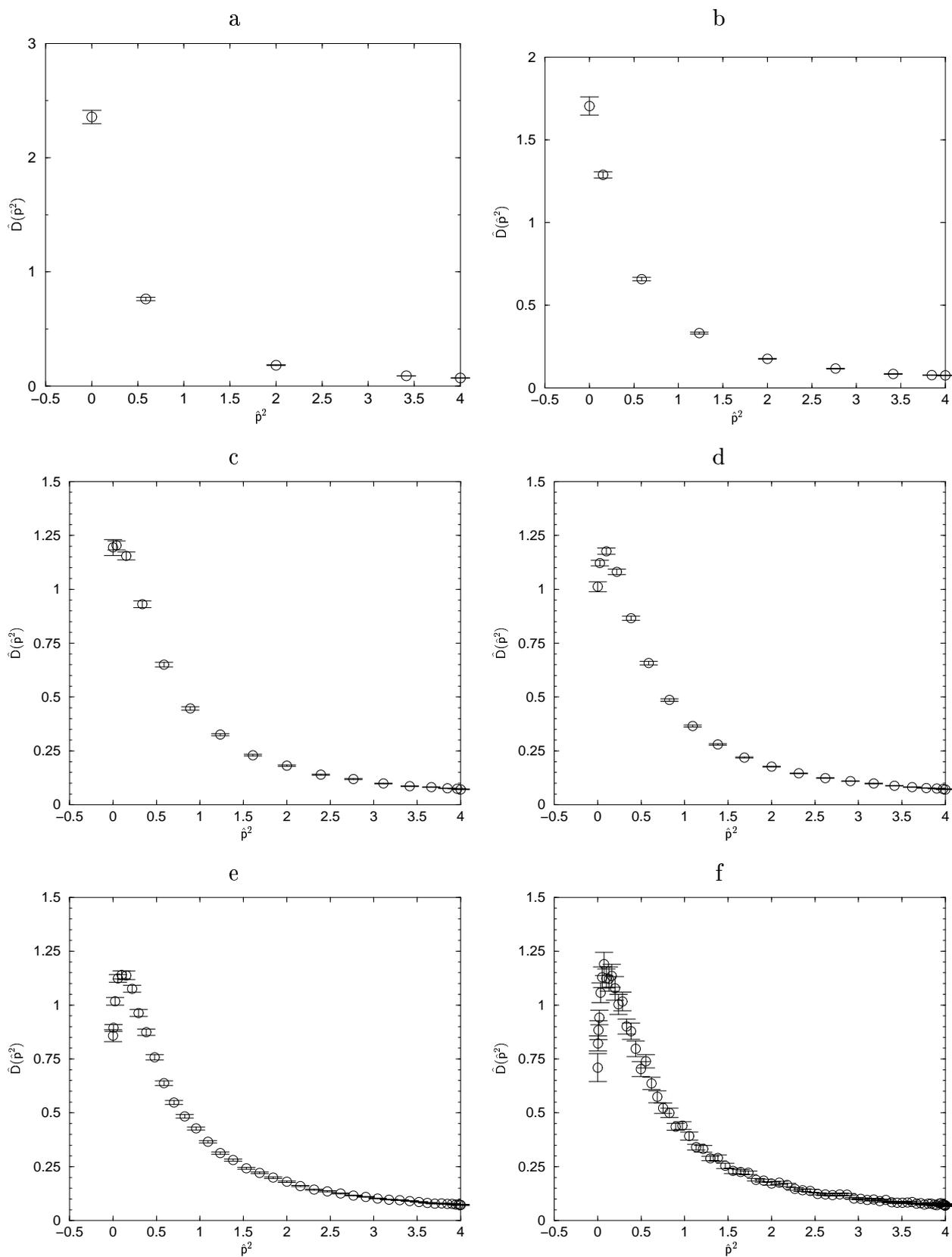


Fig. 4.2: $\hat{D}(\hat{p}^2) \times \hat{p}^2$ para $\beta = 4.2$. a) 8^3 , b) 16^3 , c) 32^3 , d) 40^3 , e) 80^3 , f) 140^3 .

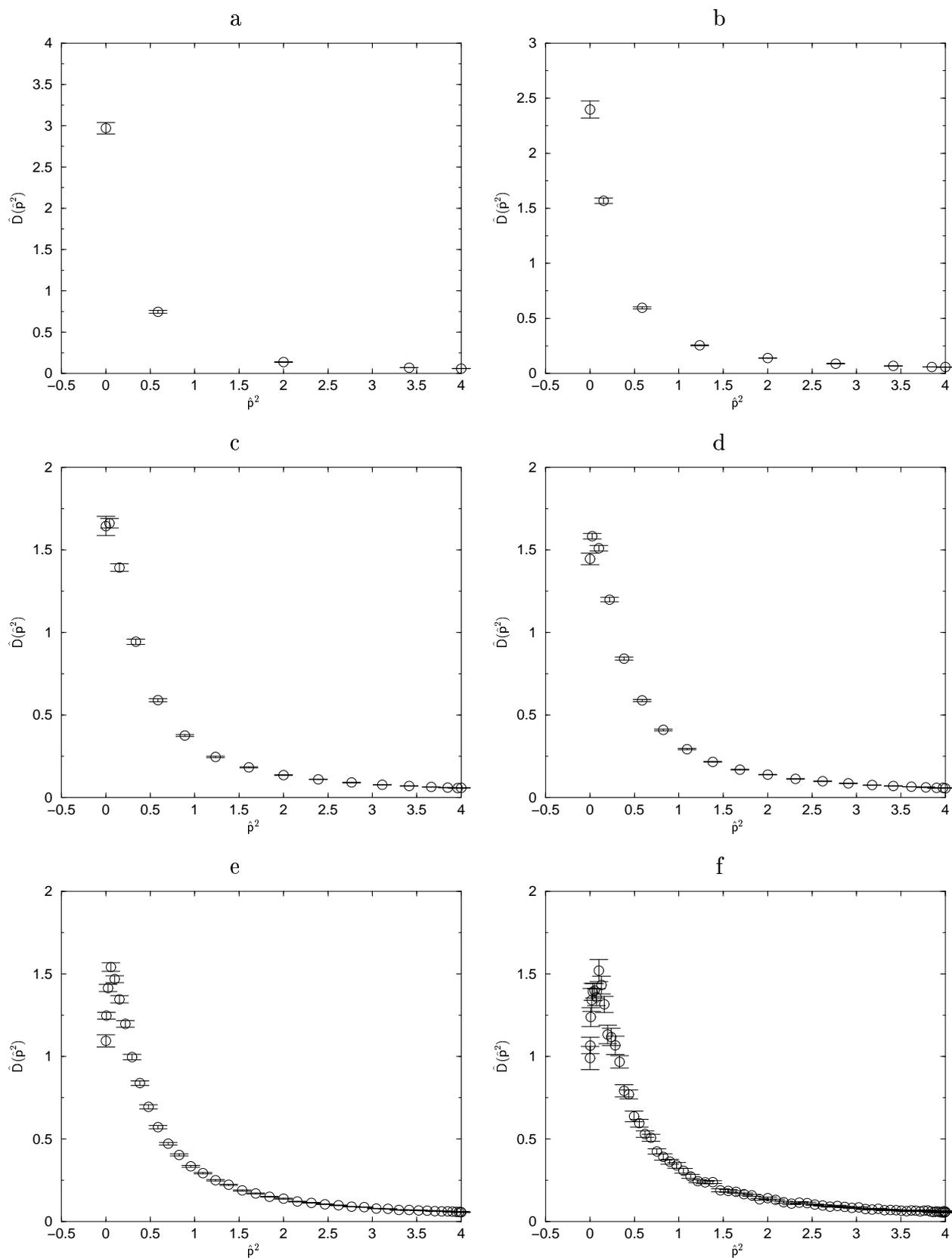


Fig. 4.3: $\hat{D}(\hat{p}^2) \times \hat{p}^2$ para $\beta = 5.0$. a) 8^3 , b) 16^3 , c) 32^3 , d) 40^3 , e) 80^3 , f) 140^3 .

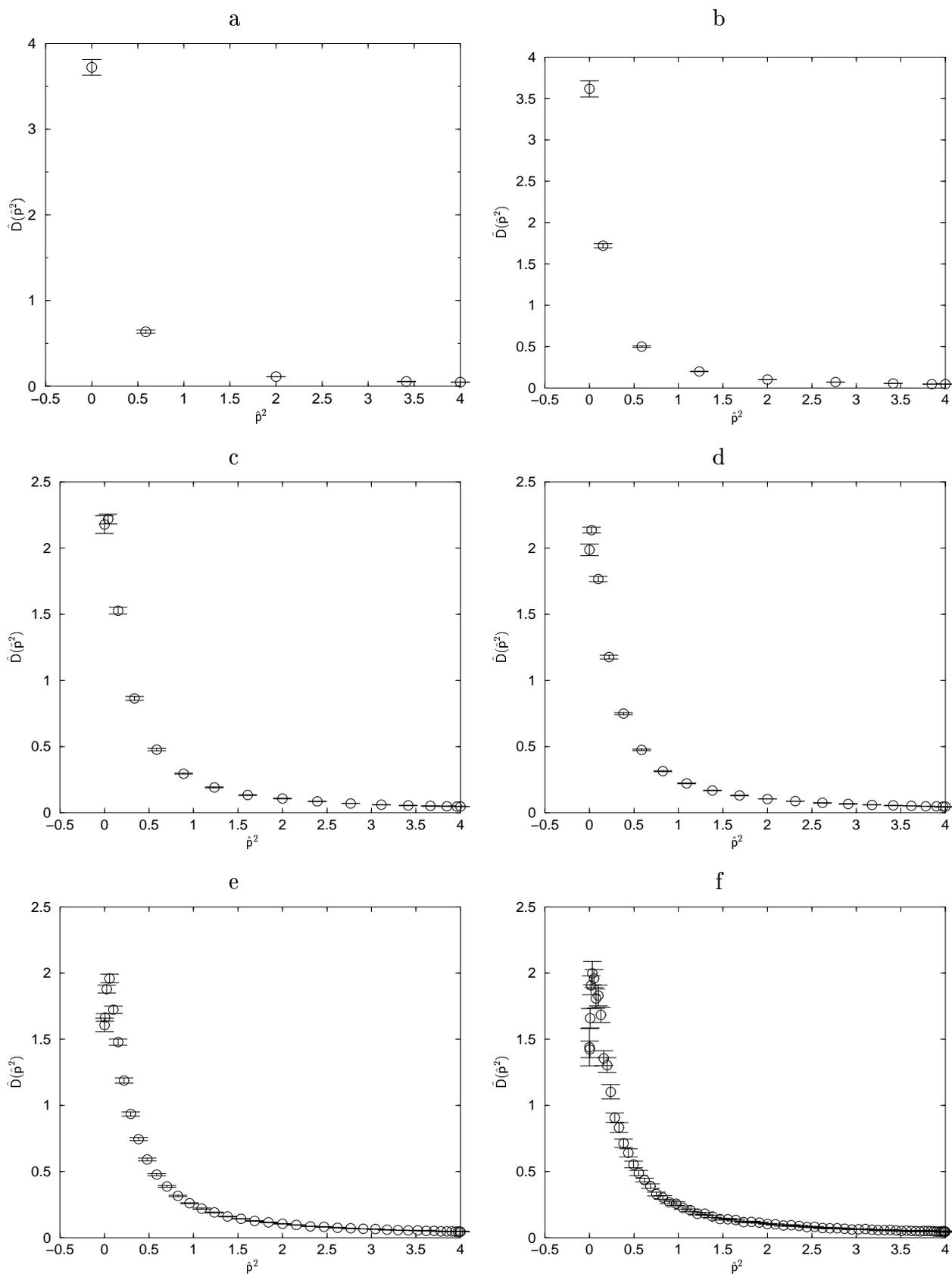


Fig. 4.4: $\hat{D}(\hat{p}^2) \times \hat{p}^2$ para $\beta = 6.0$. a) 8^3 , b) 16^3 , c) 32^3 , d) 40^3 , e) 80^3 , f) 140^3 .

4.2.1 Colapso de dados

Para compararmos os dados em diferentes β 's aplicamos o método do colapso de dados³ descrito em [41, Sec. V.B.2].

Qualquer que seja a regularização escolhida em uma teoria quântica de campos, a renormalização envolve um regulador δ e uma escala de energia μ a partir da qual as quantidades físicas são definidas. Por exemplo, em Yang-Mills temos a seguinte relação entre o propagador nu ($D(q^2, \delta)$) e o renormalizado ($D_R(q^2, \mu)$):

$$D_R(q^2, \mu) = Z_3^{-1}(\mu, \delta) D(q^2, \delta) . \quad (4.4)$$

Note que o lado esquerdo não depende do regulador δ , já que destas grandezas renormalizadas retiramos as quantidades físicas, as quais não podem depender do método de regularização. Na rede temos δ igual ao espaçamento da rede e em nossa notação a equação acima fica

$$D_R(q^2, \mu) = Z_3^{-1}(\mu, a) D(q^2, a) , \quad (4.5)$$

ou ainda

$$D_R(q^2, \mu) = Z_3^{-1}(\mu, a) a^2 \hat{D}(qa) . \quad (4.6)$$

A idéia do colapso de dados é comparar a expressão acima para dois espaçamentos de redes diferentes (o que equivale a dizer dois β 's diferentes):

$$\frac{\hat{D}(qa_f)}{\hat{D}(qa_c)} = \frac{Z_3(\mu, a_f) D_R(q^2, \mu) / a_f^2}{Z_3(\mu, a_c) D_R(q^2, \mu) / a_c^2} = R_Z R_a^{-2} , \quad (4.7)$$

onde

$$R_Z = \frac{Z_f}{Z_c} = \frac{Z_3(\mu, a_f)}{Z_3(\mu, a_c)} , \quad (4.8)$$

$$R_a = \frac{a_f}{a_c} . \quad (4.9)$$

Note que já temos R_a , precisamos apenas encontrar R_Z .

Investigamos efeitos de volume finito comparando dados em redes de tamanho diferente e mesmo β . Desta maneira encontramos (para cada β) um intervalo de momenta ultra-violeta (UV) para o qual os dados estão livres das correções de volume finito. Fazemos então um colapso de dados para estes momenta em $V = 40^3$, já que para esta rede grande os erros são menores ($\sim 1\%$).

Explicitamente, para colapsar dados obtidos em dois valores diferentes de β primeiramente interpolamos os dados para o maior β (rede mais fina) usando o método de spline cúbico [37]. Então encontramos o fator multiplicativo R_Z correspondente ao melhor ajuste χ^2 da rede mais grossa para o mesmo spline. O erro em R_Z é estimado usando procedimento similar ao descrito em [41]. Não fixamos o fator global Z impondo uma condição de renormalização, como feito por exemplo na referência [140] (nosso caso equivale a arbitrar $Z(a) = 1$ em $\beta = 6.0$).

³ *Matching technique.*

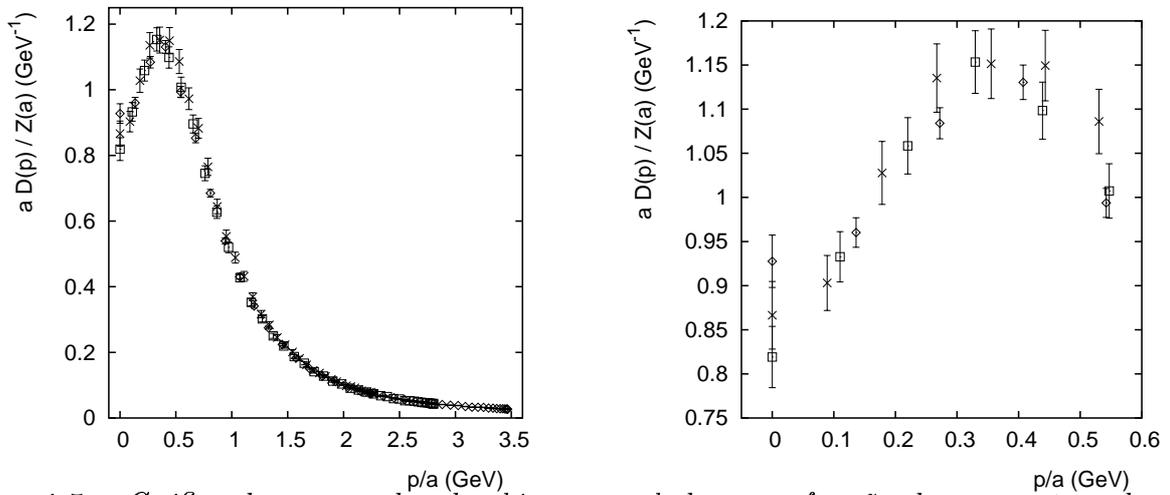


Fig. 4.5: Gráfico do propagador do glúon reescalado como função do momentum da rede para $V = 80^3$ e $\beta = 4.2$ (\times), 5.0 (\square), 6.0 (\diamond). O segundo gráfico mostra somente a região infravermelha. Erros são obtidos a partir da propagação de erros.

O método funciona muito bem (ver figura 4.5), os dados obtidos após o colapso estão mostrados, para $V = 80^3$, na figura 4.5. Claramente, encontramos que o propagador do glúon decresce no limite infravermelho para momenta menores que p_{dec} , o que corresponde à escala de massa no propagador tipo-Gribov. Da figura estimamos $p_{dec} = 350_{-50}^{+100}$ MeV, em concordância com a ref. [32].

4.2.2 Propagador do glúon na rede em momentum zero

Na figura 4.2.2 graficamos o propagador do glúon reescalado em momentum zero, ou seja $aD(0)/Z(a)$, como função do lado da rede, $L^{-1} = 1/(aN)$, em unidades físicas (fm^{-1}). Vemos que $aD(0)/Z(a)$ decresce monotonicamente com aumento de L , de acordo com ref. [33]. É interessante notar que estes dados são bem ajustados usando o Ansatz $d + b/L^c$, tanto com $d = 0$ quanto $d \neq 0$ (ver figura 4.2.2). Para escolher entre estes dois possíveis valores precisaríamos ir para redes ainda maiores. Planejamos estender estas simulações para $\beta = 3.4$ e redes de tamanho até 260^3 , permitindo-nos considerar um valor de $L^{-1} \approx 0.017 \text{ fm}^{-1}$. (Isto requereria rodar a rede em todos os nós da pilha de 16 pc's)

4.3 Ajuste a formas analíticas

Ajustamos os dados usando uma fórmula do tipo-Gribov (ou ainda, tipo-Stingl)

$$D_{\text{Stingl}}(p) = \frac{s + z p^{2\alpha}}{y^2 + (p^2 + x)^2}, \quad (4.10)$$

onde z, s, α, x e y são parâmetros de ajuste. Para α não-negativo isto implica em um propagador do glúon finito no limite IR, com um comportamento dado por $D_{\text{Stingl}}(p) \propto (s + z p^{2\alpha})$. Se $y^2 > 0$ esta forma corresponde a um propagador com pólos em $m_{\pm}^2 = -x \pm iy$, enquanto se $y^2 \leq 0$ os pólos são reais. Notamos que o expoente IR κ considerado nos estudos

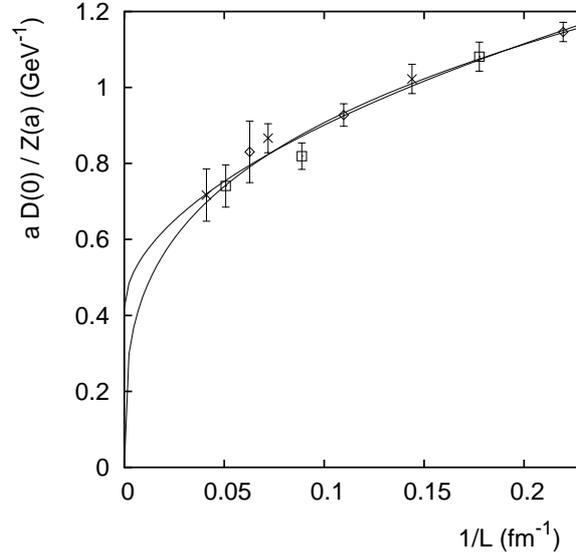


Fig. 4.6: Gráfico do propagador do glúon em momentum zero reescalado como função do lado da rede para $\beta = 4.2$ (\times), 5.0 (\square), 6.0 (\diamond). Mostramos também o ajuste usando o Ansatz $d + b/L^c$ tanto para $d = 0$ e $d \neq 0$. Erros são obtidos a partir da propagação de erros.

das EDS é dado em termos de α por $\kappa = (1 + \alpha)/2$, assumindo $D(0) = 0$. Resultados deste ajuste para os dados da rede (não reescalados) $D(k)$ são apresentados na tabela 4.4. Vemos que α decresce com o aumento do volume da rede. Ademais, $y^2 > 0$ e $x < |y|$, sugerindo o cenário de pólos puramente imaginários encontrado em [138]. Lembramos que os pólos do propagador do glúon são invariantes de calibre em todas as ordens da teoria de perturbação [197, 198].

Nota-se, no entanto, que este ajuste leva em geral a um comportamento UV errado, ou seja $D_{\text{Stingl}}(p) \sim p^{2\alpha-4}$. Isto não é um problema sério, já que o maior momento que acessamos é de aproximadamente 3.5 GeV, i.e. não estamos de fato explorando o limite UV. Por outro lado, o expoente α em (4.10) tem papel tanto no regime IR quanto no UV. Assim, os valores obtidos para α correspondem a uma média do comportamento do propagador nestes dois regimes. Em particular, já que esperamos $D(p) \sim p^{-2}$ no limite UV, é provável que o comportamento IR do propagador seja dado por um expoente α menor que os apresentados na tabela 4.4.

Para verificar isso fazemos $x = 0$ e introduzimos uma dimensão anômala γ :

$$D_{\text{Anomalous}}(p) = \frac{s + z p^{2\alpha}}{y^2 + p^{2(1+\gamma)}}. \quad (4.11)$$

Resultados deste ajuste também estão na tabela 4.4. De fato, obtemos valores de α menores que os da forma anterior (e ainda decrescente com o aumento do tamanho físico da rede). Para dimensão anômala obtemos $\gamma \approx 0.65$, com pequena dependência em V e β . O problema da forma (4.11) é que a introdução de γ compromete a interpretação física dos pólos.

β	V	$D_{\text{Stingl}}(p)$			$D_{\text{Anomalous}}(p)$	
		α	x	$ y $	α	y^2
4.2	40^3	0.69(2)	0.17(2)	0.42(1)	0.48(4)	0.29(1)
4.2	80^3	0.66(2)	0.17(2)	0.36(1)	0.46(4)	0.24(1)
4.2	140^3	0.61(4)	0.19(4)	0.35(3)	0.38(6)	0.25(2)
5.0	40^3	0.77(3)	0.11(2)	0.28(2)	0.53(6)	0.152(8)
5.0	80^3	0.71(2)	0.11(1)	0.214(9)	0.45(3)	0.118(6)
5.0	140^3	0.71(3)	0.10(2)	0.22(2)	0.44(6)	0.12(1)
6.0	40^3	0.86(3)	0.069(8)	0.20(2)	0.64(6)	0.082(6)
6.0	80^3	0.84(2)	0.032(6)	0.166(8)	0.65(5)	0.051(3)
6.0	140^3	0.80(2)	0.037(8)	0.123(7)	0.55(6)	0.040(4)

Tab. 4.4: Ajustes dos dados às fórmulas (4.10) e (4.11). Em todos os casos $\chi^2/d.o.f.$ é de ordem 1.

Finalmente, também tentamos a forma

$$D_{\text{nov}}(p) = \frac{s + zp^{2\alpha}}{(y^2 + p^4)^\gamma}. \quad (4.12)$$

Esta corresponde a um propagador com pólos puramente imaginários $m_{\pm}^2 = \pm iy$ e ao mesmo tempo permite uma separação nítida entre o comportamento IR e UV dos dados. O problema é a instabilidade do ajuste em redes pequenas, dada a escassez de pontos no IR. No entanto, para $V = 140^3$ o ajuste funciona bem e obtemos $\alpha = 0.27(6)$, $0.29(7)$, $0.38(8)$ respectivamente para $\beta = 4.2, 5.0, 6.0$ e $\gamma \approx 0.72$. Assim, α é da ordem de 0.3, correspondendo a $\kappa \approx 0.65$. (Novamente verifica-se o decréscimo de α com aumento do volume físico da rede.)

Para verificar possíveis efeitos de quebra de invariância rotacional [199] refizemos nossos ajustes substituindo $p^2(k)$ por $\tilde{p}^2(k) \equiv p^2(k) + p^{[4]}(k)/12$ (ver [200]). Espera-se que esta modificação tenha papel importante apenas no UV. Para todos valores de β e V obtemos bons ajustes e resultados similares aos apresentados acima. Em particular, usando a expressão (4.10) ainda se obtém $y^2 > 0$ e $x < |y|$. Ao mesmo tempo, para as três formas acima, α decresce com o aumento do volume físico, mas seu valor é de aproximadamente 20 – 30% maior que os apresentados na tabela 4.4 e acima. Usando expressão (4.12) e dados para $V = 140^3$ encontramos $\alpha = 0.32(7)$, $0.39(8)$, $0.59(12)$ respectivamente para $\beta = 4.2, 5.0, 6.0$ e $\gamma \approx 0.7$. Isto implica em valores de $\kappa = (1 + \alpha)/2$ um pouco maiores. Análise destes efeitos de discretização e a influência no expoente crítico κ é uma continuação natural deste trabalho.

4.3.1 Transformada parcial de Fourier

O bom ajuste dos dados das simulações a formas tipo-Gribov desperta interesse na investigação numérica de suas transformadas parciais de Fourier, já que, como detalhado na seção B.9, estas não seriam sempre positivas. Isto tem consequências no entendimento do confinamento.

Podemos representar⁴ o propagador total de uma teoria de campos interagente em termos

⁴ Representação de Lehman, também conhecida como Källen-Lehman [29, 30].

do propagador livre $\Delta(x, m^2)$ e de uma função espectral $\rho(m^2)$ não-negativa

$$D(x) = \int_0^{+\infty} dm^2 \rho(m^2) \Delta(x, m^2). \quad (4.13)$$

A positividade de $\rho(m^2)$ provém da exigência de positividade dos produtos escalares no espaço de Hilbert. Em (4.13) é clara a suposição da existência de estados assintóticos livres, base também para o formalismo da teoria de colisões LSZ [87]. Evidência de valores negativos para $\rho(m^2)$ é considerada condição *suficiente* para o confinamento de cor [18, 43].

No espaço de Euclides a condição de positividade é dada pelo axioma da *positividade especular*⁵ [24, 25] que no caso de funções de Green de 2-pontos é escrita como [43]

$$\int d^d x d^d y \bar{f}(\vec{x}, -x_0) D(x-y) f(\vec{y}, y_0) \geq 0, \quad (4.14)$$

onde $f(\vec{x}, x_0)$ são funções teste complexas ($x_0 > 0$). Integrando sobre os momenta espaciais, a relação acima é reescrita como

$$\int_0^\infty dt dt' \bar{f}(t', \vec{q}) C(-(t+t'), \vec{q}) f(t, \vec{q}) \geq 0, \quad (4.15)$$

deixando claro que se

$$C(-(t+t'), \vec{q}) < 0 \quad (4.16)$$

em algum intervalo de seu domínio a condição de positividade (4.15) é violada. Para $\vec{q} = 0$ temos a função de Schwinger

$$C(t) \equiv C(t, \vec{q} = 0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dq_0}{2\pi} e^{iq_0 t} \sigma(q_0^2), \quad (4.17)$$

onde $\sigma(q_0^2)$ é uma função escalar associada ao propagador que estamos considerando (em nosso caso $\sigma(q_0^2) = D(q_0^2, \vec{q} = 0)$). Da definição acima é claro que $C(t)$ é uma função par. Assim, se encontramos regiões ou pontos em $t > 0$ para o qual $C(t) < 0$, a condição de violação (4.16) é respeitada.

Como detalhado na seção B.10, utilizaremos como versão discretizada da função de Schwinger a expressão

$$C(t) = \frac{1}{L} \sum_{k_0=0}^{N-1} e^{i2\pi k_0 t/N} \mathbf{D}(k_0), \quad (4.18)$$

que dimensionalmente é dada por

$$\hat{C}(\hat{t}) = \frac{1}{N} \sum_{k_0=0}^{N-1} e^{i2\pi k_0 \hat{t}/N} \hat{\mathbf{D}}(k_0). \quad (4.19)$$

Investiga-se principalmente o decaimento da função de Schwinger, pois ele traz informações sobre a massa da partícula associada ao campo do propagador. Por exemplo, para

⁵ *Reflection positivity.*

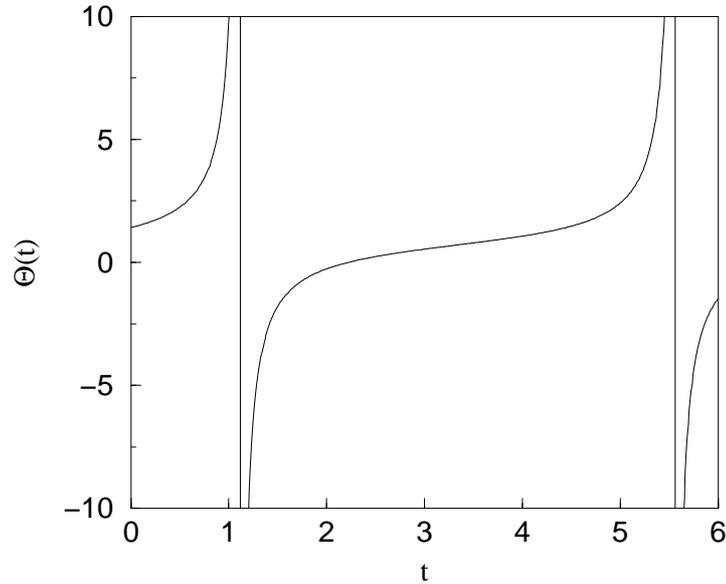


Fig. 4.7: Função $\Theta(t)$ para o propagador de Gribov ($m = 1$).

o propagador massivo livre temos $\hat{C}(\hat{t}) \propto e^{-\hat{m}\hat{t}}$ e a investigação de seu decaimento é feita usando a grandeza

$$\Delta\hat{C}(t) = \log \left(\frac{\hat{C}(\hat{t})}{\hat{C}(\hat{t}+1)} \right). \quad (4.20)$$

No caso do propagador massivo livre teríamos $\Delta\hat{C}(t) = \hat{m}$. No entanto, para investigar esta grandeza em nosso caso, onde as funções de Schwinger trocam de sinal, não podemos usar (4.20), pois esta envolve logaritmos.

Alternativamente definimos no contínuo uma grandeza $\Theta(t, a)$ como

$$\Theta(t, a) \equiv \frac{1}{a} \left[\frac{C(t)}{C(t+a)} - 1 \right]; \quad (4.21)$$

no limite em que $a \rightarrow 0$ temos

$$\Theta(t, a = 0) = \frac{1}{C(t)} \lim_{a \rightarrow 0} \frac{C(t) - C(t+a)}{a}; \quad (4.22)$$

$$= \frac{-C'(t)}{C(t)}, \quad (4.23)$$

o mesmo limite da versão contínua de (4.20). Assim, evitamos os logaritmos definindo na rede a grandeza

$$\hat{\Theta}(\hat{t}) = \frac{\hat{C}(\hat{t})}{\hat{C}(\hat{t}+1)} - 1. \quad (4.24)$$

Os resultados para $\hat{C}(\hat{t})$ em todas as redes são mostrados nas figuras 4.8, 4.9, 4.10 e 4.11 para $\beta = 3.0, 4.2, 5.0$ e 6.0 , respectivamente. Os erros são bastante pequenos na escala

destes gráficos e não são mostrados. É bastante claro que à medida que aumentamos o volume da rede, $\hat{C}(t)$ começa a ter valores negativos. Em nossas simulações encontramos este comportamento para redes maiores que 32^3 , em todos os β 's. Para as redes de 80^3 e 140^3 o comportamento oscilatório é evidente.

Ampliações das redes 80^3 e 140^3 para $\beta = 5.0$ e 6.0 são mostradas na figura 4.12. Mesmo com as barras de erros introduzidas, os valores negativos e a oscilação da função de Schwinger são indiscutíveis. Gráfico logarítmico onde as barras de erros foram removidas são apresentadas para estas redes em 4.13; as cúspides nestes gráficos indicam a troca de sinal de $\hat{C}(t)$.

Temos assim *clara indicação de violação da positividade em YM_3^2* , condição suficiente para o confinamento de cor nesta teoria.

Se usarmos a função de Schwinger associada ao propagador de Gribov (eq. (B.127)) na definição (4.23) do contínuo teríamos

$$\Theta(t, a = 0) = \frac{m}{\sqrt{2}} \left[1 + \tan\left(\frac{mt}{\sqrt{2}} + \frac{\pi}{4}\right) \right] ; \quad (4.25)$$

a forma acima é graficada na figura 4.7. Ela possui divergências nos pontos

$$t = \frac{\sqrt{2}}{m} \left((2n + 1) \frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4} \right) , \quad (4.26)$$

com distância fixa entre si. Para as redes $80^3, 140^3$ com $\beta = 5.0, 6.0$, graficamos na figura 4.14. a grandeza $\hat{\Theta}(t)$. É clara a existência de divergências do tipo tangente encontrado em (4.25), mas com distância progressivamente *menor* entre elas.

4.4 Performance computacional

Como mencionado no capítulo anterior, nossas simulações foram feitas na pilha de pc's do IFSC-USP, um sistema com 16 nós e um servidor, todos com 866 MHz Pentium III CPU. Os nós têm 256 MB de memória RAM (a 133 MHz) e o sistema operacional é o **Debian GNU/Linux** (versão 3.0r0). As máquinas estão conectadas por uma rede **Fast-Ethernet** 100 Mbps full-duplex através de um chaveador 3COM. Os diretórios dos usuários estão localizados no servidor, o qual possui dois discos SCSI, e são "montados" pelos nós usando NFS. O servidor não é usado nos cálculos.

Nosso programa, assim como o pacote QCDMPI do qual partiu, está escrito em FORTRAN 77 utilizando a biblioteca MPI para comunicação inter-nós. O programa pode rodar em uma rede de dimensão $d \geq 2$, apesar de só o utilizarmos nesta tese em $d = 3$. Utilizamos a implementação MPICH (versão 1.2.1-16) e o compilador g77 (versão 0.5.24). Na compilação foram utilizadas as opções:

```
-march=pentiumpro -fomit-frame-pointer -mpreferred-stack-boundary=2 -O3.
```

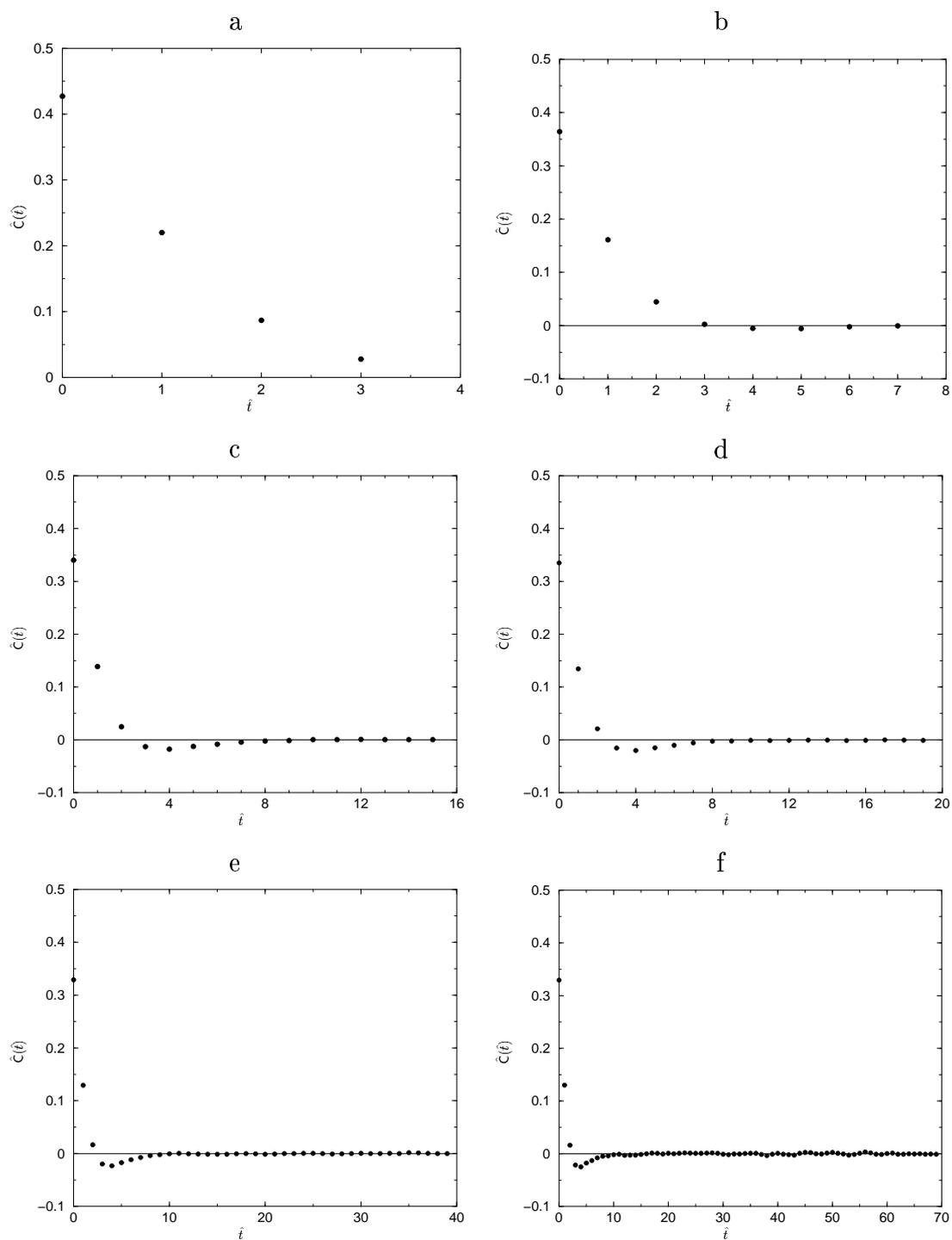


Fig. 4.8: $\hat{C}(t) \times t$ para $\beta = 3.0$. a) 8^3 , b) 16^3 , c) 32^3 , d) 40^3 , e) 80^3 , f) 140^3 .

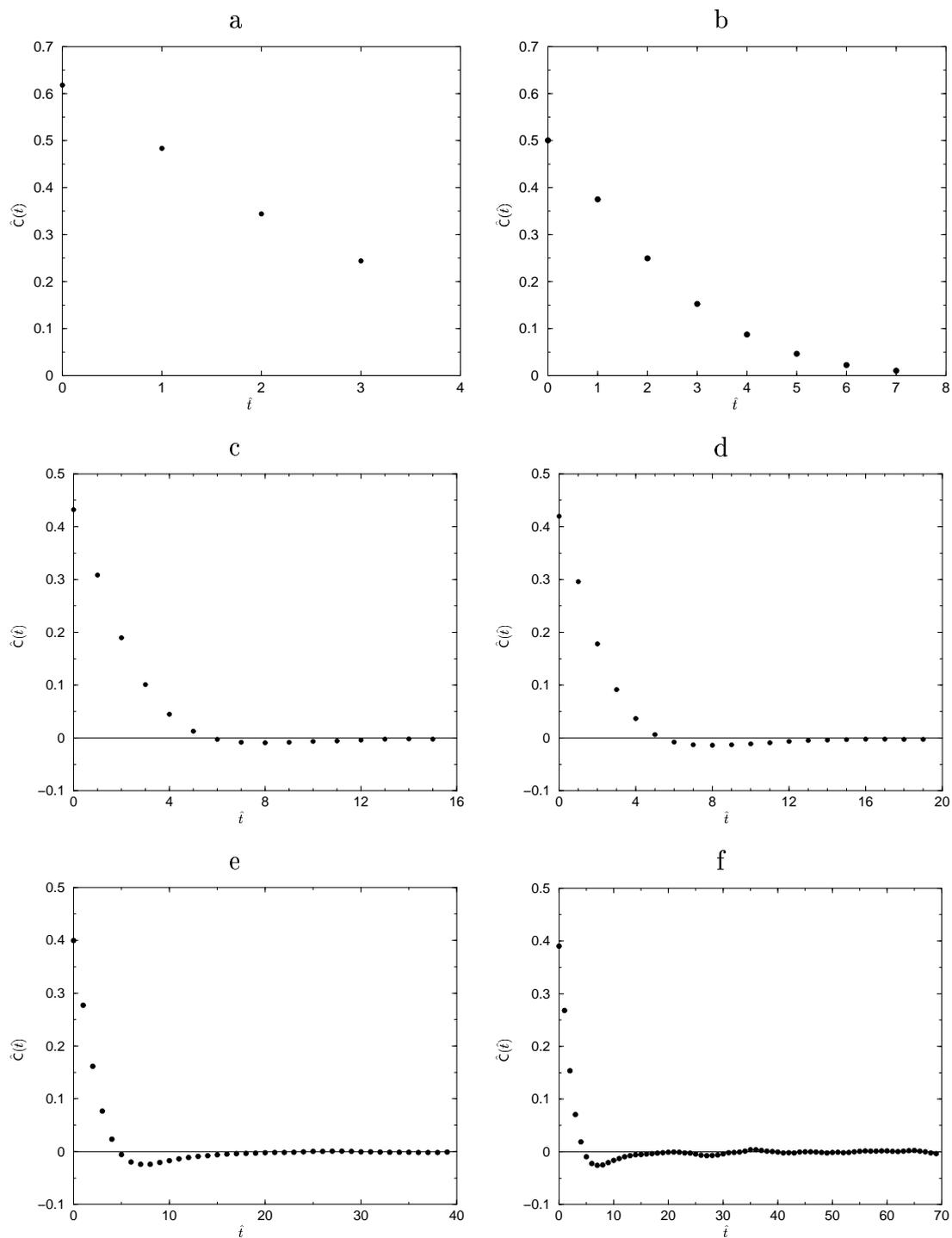


Fig. 4.10: $\hat{C}(\hat{t}) \times \hat{t}$ para $\beta = 5.0$. a) 8^3 , b) 16^3 , c) 32^3 , d) 40^3 , e) 80^3 , f) 140^3 .

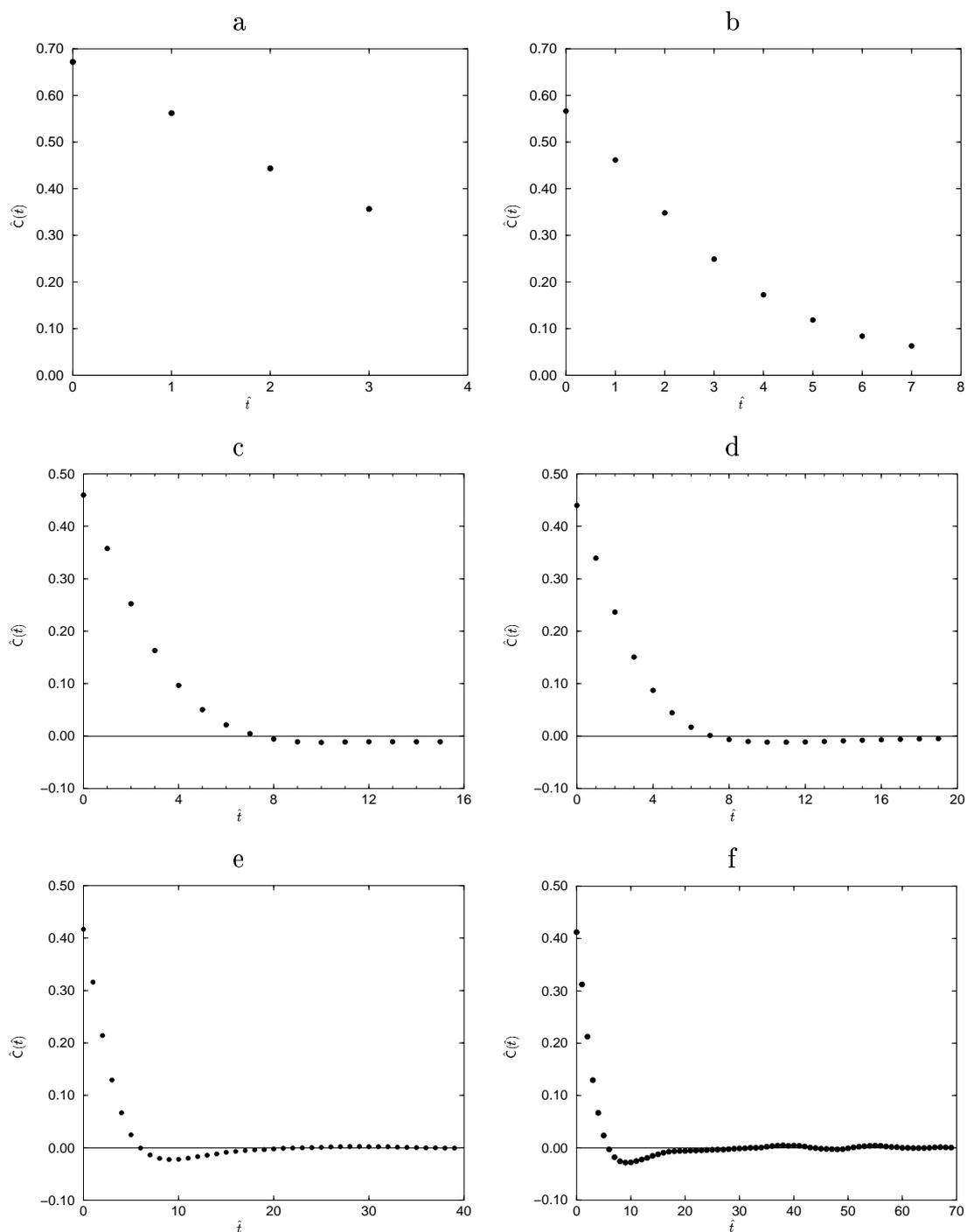


Fig. 4.11: $\hat{C}(\hat{t}) \times \hat{t}$ para $\beta = 6.0$. a) 8^3 , b) 16^3 , c) 32^3 , d) 40^3 , e) 80^3 , f) 140^3 .

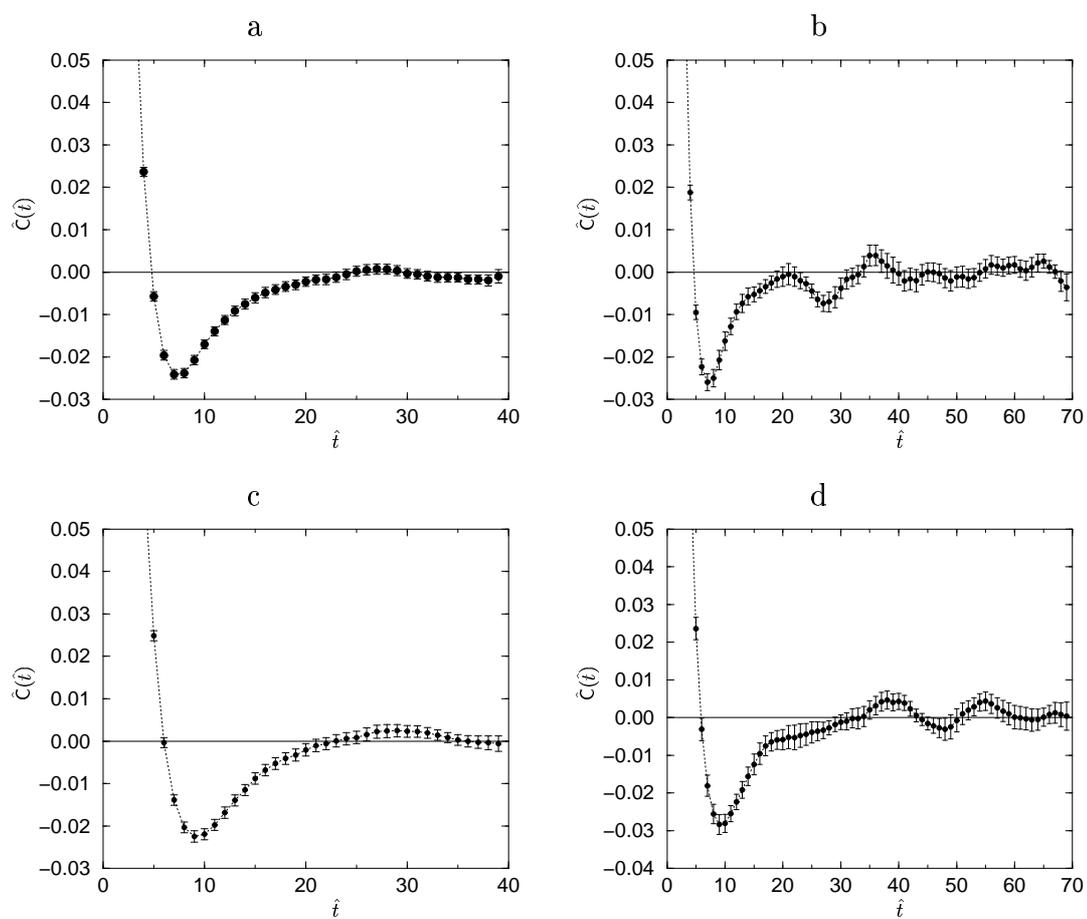


Fig. 4.12: Oscilações ampliadas em $\hat{C}(\hat{t}) \times \hat{t}$ para $\beta = 5.0$ (a) 80^3 , b) 140^3) e $\beta = 6.0$ (c) 80^3 , d) 140^3).

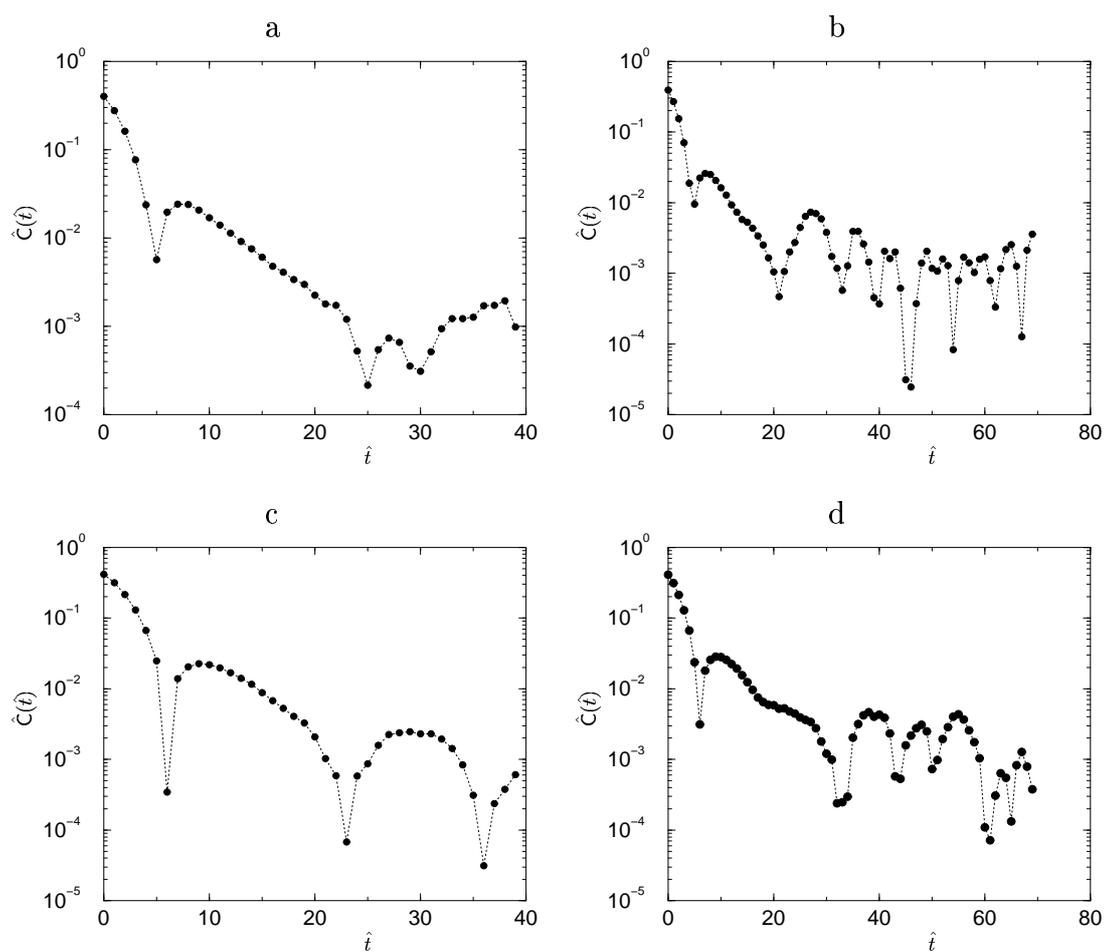


Fig. 4.13: $\hat{C}(\hat{t}) \times \hat{t}$ em escala logarítmica para $\beta = 5.0$ (a) 80^3 , b) 140^3) e $\beta = 6.0$ (c) 80^3 , d) 140^3).

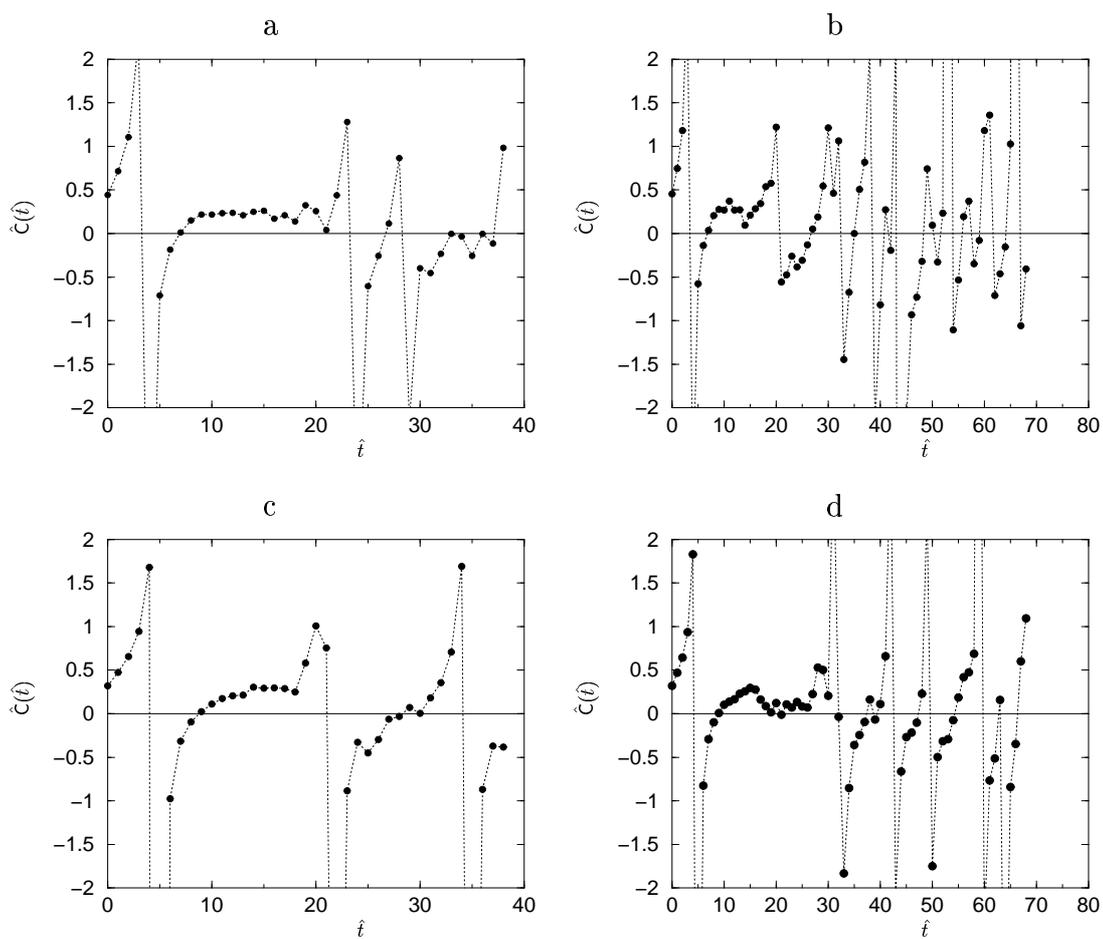


Fig. 4.14: $\hat{\Theta}(\hat{t}) \times \hat{t}$ para $\beta = 5.0$ (a) 80^3 , b) 140^3) e $\beta = 6.0$ (c) 80^3 , d) 140^3).

M	Topologia dos nós	t_{hb}	t_{mc}
1	$1 \times 1 \times 1$	10.341(4)	6.0190(1)
2	$2 \times 1 \times 1$	5.6(2)	3.2099(4)
4	$2 \times 2 \times 1$	2.78(2)	1.6958(3)
4	$4 \times 1 \times 1$	2.898(6)	1.817(3)
8	$2 \times 2 \times 2$	1.435(7)	0.8881(3)
8	$4 \times 2 \times 1$	1.48(2)	0.9125(6)
8	$8 \times 1 \times 1$	1.9(1)	1.236(4)
16	$4 \times 2 \times 2$	0.758(7)	0.4732(3)
16	$4 \times 4 \times 1$	0.75(1)	0.4614(4)
16	$8 \times 2 \times 1$	0.849(8)	0.5677(3)
16	$16 \times 1 \times 1$	1.25(1)	0.6735(5)

Tab. 4.5: Tempo médio de CPU (em μs) para atualizar um elo $U_\mu(x)$ usando algoritmo de Banho-Térmico (t_{hb}) ou microcanônico (t_{mc}).

Como visto, o primeiro passo nas simulações é a termalização, o que em nosso caso foi feita usando o algoritmo HOR; isto requer centenas de varreduras da rede correspondendo a várias horas para produzir uma nova configuração. O segundo passo, avaliação dos observáveis, em nosso caso é ainda mais demorado. A avaliação do propagador é feita após a configuração ter seu calibre fixado por algum método de minimização. Precisamos frequentemente de milhares de iterações de forma a alcançar a precisão estabelecida (por exemplo $\Sigma_Q \leq 10^{-12}$). A computação em si do propagador do glúon é, comparativamente, de duração desprezível⁶. Assim, para valores de redes utilizados na tese, uma simulação completa pode levar vários meses. Em particular, para gerar os dados desta tese [34], o programa rodou na pilha de pc's por quase três meses. Na próxima sub-seção relatamos em mais detalhes os tempos das simulações. Notamos desde já que o tempo total de CPU por configuração pouco muda com alterações no parâmetro β . (Para menores (maiores) valores de β gasta-se um pouco menos (mais) tempo para termalização e um pouco mais (menos) tempo para a fixação do calibre.)

Relatamos abaixo algumas rodadas feitas para testar o aumento da performance e eficiência do programa [44].

4.4.1 Aumento da performance a volume fixo

Fizemos testes para os algoritmos, considerando uma rede de volume fixo $V = 64^3$, usando 1, 2, 4, 8 e 16 nós. Notamos que o tamanho da rede é relativamente pequeno. De fato, pode ser simulado em um único nó (sem paralelização) usando menos que 20% da memória. Assim, já que as comunicações são proporcionais à área da superfície da rede local em um nó, os testes correspondem a uma situação mais desfavorável que as consideradas nas simulações completas mostradas anteriormente neste capítulo [34].

Nas tabelas 4.5 e 4.6 apresentamos o tempo médio de CPU (em micro-segundos) necessário para atualizar o elo $U_\mu(x)$ usando os algoritmos de Banho-Térmico (t_{hb}) e microcanônico

⁶ Isto não é válido para o propagador fantasma o qual exigiria a inversão de uma matriz muito grande.

M	Topologia dos nós	t_{cor}	t_{stoc}
1	$1 \times 1 \times 1$	5.606(2)	6.272(2)
2	$2 \times 1 \times 1$	2.9659(7)	3.295(1)
4	$2 \times 2 \times 1$	1.560(1)	1.7232(5)
4	$4 \times 1 \times 1$	1.6063(5)	1.789(1)
8	$2 \times 2 \times 2$	0.819(1)	0.9011(4)
8	$4 \times 2 \times 1$	0.833(1)	0.9175(7)
8	$8 \times 1 \times 1$	1.0228(5)	1.1133(4)
16	$4 \times 2 \times 2$	0.4383(3)	0.4771(2)
16	$4 \times 4 \times 1$	0.4315(4)	0.4706(1)
16	$8 \times 2 \times 1$	0.4870(6)	0.5296(2)
16	$16 \times 1 \times 1$	0.5924(4)	0.644(3)

Tab. 4.6: Tempo médio de CPU (em μs) para atualizar uma variável $g(x)$ usando os métodos de fixação de calibre COR (t_{cor}) e SOR (t_{stoc}).

(t_{mc}), e o tempo para atualizar uma variável $g(x)$ usando os métodos de fixação de calibre de Cornell (COR) (t_{cor}) e sobre-relaxação estocástica (SOR) (t_{stoc}). Estes tempos são dados para diferentes valores dos números de nós M e diferente topologia de nós (tridimensional).

4.4.2 Aumento de performance a volume variável

Também consideramos testes a volume variável, considerando cinco topologias de nós diferentes: $1 \times 1 \times 1$, $1 \times 1 \times 2$, $1 \times 2 \times 2$, $2 \times 2 \times 2$ e $2 \times 2 \times 4$, correspondente respectivamente a $M = 1, 2, 4, 8$ e 16 nós. Para cada topologia de nós simulamos três diferentes volumes de rede V .

Resultados destes testes são apresentados nas tabelas 4.7 e 4.8 para diferentes números de nós M e para vários volumes de rede. Como pode ser inferido das duas primeiras colunas, o volume de rede é tal que a rede local $v = V/M$ é sempre dado por um dos seguintes casos: 4^3 , 16^3 e 64^3 . Notamos que este arranjo está perto do que realmente é feito nas simulações. De fato, quando fazemos simulações paralelas em volumes crescentes de rede na pilha de pc's é preferível preencher a memória em cada nó antes de aumentar o número de nós. (Isto reduz a porcentagem de tempo gasto em comunicação.)

Os tempos de CPU apresentados acima indicam que a paralelização é bastante boa para os quatro algoritmos considerados (banho-térmico e micro-canônico para termalização, e COR e SOR para fixação de calibre).

Os valores do aumento de performance $S = t_1/t_M$ (e da eficiência $E = S/M$) são bastante similares. A média dos quatro métodos é apresentada na tabela 4.9. Para análise a volume fixo apresentamos resultados para topologia de nós $2 \times 2 \times 1$, $2 \times 2 \times 2$ e $4 \times 4 \times 1$ respectivamente para os casos $M = 4, 8$ e 16 . (Isto corresponde à melhor performance para um dado número de nós) Para volume variável consideramos os resultados obtidos usando o maior volume de rede para cada topologia.

Claramente vemos que obtemos uma boa paralelização mesmo para o caso de volume fixo e usando um volume de rede relativamente pequeno V . De fato, a eficiência decresce vagaro-

M	V	t_{hb}	t_{mc}
1	4^3	4.76(1)	1.028(2)
1	16^3	8.05(6)	4.1821(9)
1	64^3	10.383(5)	6.0186(1)
2	$4^2 \times 8$	9.19(2)	7.08(1)
2	$16^2 \times 32$	4.9(1)	2.7561(9)
2	$64^2 \times 128$	5.39(7)	3.1184(2)
4	4×8^2	8.1(2)	7.4(3)
4	16×32^2	2.708(9)	1.6940(9)
4	64×128^2	2.768(3)	1.6175(3)
8	8^3	5.94(8)	5.02(6)
8	32^3	1.54(2)	1.0090(2)
8	128^3	1.55(8)	0.8447(3)
16	$8^2 \times 16$	5.8(6)	4.4(2)
16	$32^2 \times 64$	0.763(2)	0.5111(3)
16	$128^2 \times 256$	0.77(1)	0.436(1)

Tab. 4.7: Tempo médio de CPU (em μs) para atualizar um elo $U_\mu(x)$ usando algoritmo de Banho-Térmico (t_{hb}) ou microcanônico (t_{mc}) para volume variável.

samente quando dobramos o número de nós, mas ainda é 0.84 em $M = 16$. Como esperado, a performance é melhor para o caso de volume variável quando consideramos grandes valores do volume da rede local v em um nó. Como dito acima, este teste está perto da situação encontrada nas simulações reais, onde as redes locais ocupam mais de 50% da memória de cada nó.

Os dados para aumento de performance a volume variável, apresentados na tabela 4.9, são satisfatoriamente ajustados pela função

$$S(M) = M(1 - c \log M) \quad (4.27)$$

com $c = 0.038 \pm 0.001$. O gráfico correspondente é mostrado na figura 4.15. Isto implicaria num aumento de performance de quase 400 para 512 nós.

A perda de eficiência ao ir de 1 para M nós a volume variável V e pequeno v é devido ao efeito desfavorável do uso da comunicação inter-nós com relação ao uso da memória cache.

Concluimos que a paralelização de nosso programa funciona muito bem e que simulações deste tipo são bastante viáveis em pilhas de pc's.

M	V	t_{cor}	t_{stoc}
1	4^3	1.21(7)	1.60(1)
1	16^3	3.90(1)	4.224(6)
1	64^3	5.606(2)	6.272(2)
2	$4^2 \times 8$	6.41(8)	6.79(4)
2	$16^2 \times 32$	2.413(5)	2.679(4)
2	$64^2 \times 128$	2.885(1)	3.2329(4)
4	4×8^2	6.2(2)	6.10(6)
4	16×32^2	1.497(3)	1.571(3)
4	64×128^2	1.4935(2)	1.6634(3)
8	8^3	4.53(6)	4.64(5)
8	32^3	0.862(2)	0.927(1)
8	128^3	0.7620(2)	0.8528(1)
16	$8^2 \times 16$	3.56(7)	4.4(2)
16	$32^2 \times 64$	0.4496(7)	0.480(1)
16	$128^2 \times 256$	0.3942(3)	0.4385(2)

Tab. 4.8: Tempo médio de CPU (em μs) para atualizar uma variável $g(x)$ usando os métodos de fixação de calibre COR (t_{cor}) e SOR (t_{stoc}) para volume variável.

	Volume fixo		Volume variável	
	S	E	S	E
$1 \rightarrow 2$	1.87(2)	0.937(8)	1.96(2)	0.981(8)
$1 \rightarrow 4$	3.61(1)	0.904(3)	3.79(1)	0.948(3)
$1 \rightarrow 8$	6.91(2)	0.863(2)	7.31(8)	0.91(1)
$1 \rightarrow 16$	13.38(6)	0.836(3)	14.5(3)	0.88(1)

Tab. 4.9: Aumento médio de performance e eficiência.

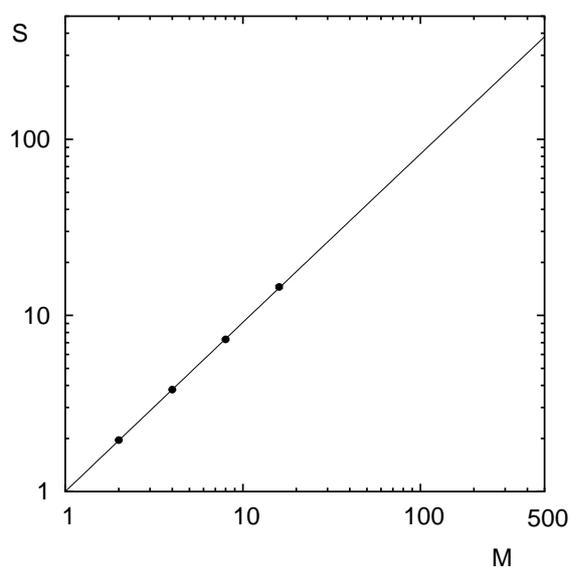


Fig. 4.15: *Aumento de performance S a volume variável como função do número de nós M .*

Conclusão e Perspectivas

Investigamos o comportamento na região do infravermelho do propagador do glúon numa rede euclidiana. Introduzimos os principais conceitos inerentes à rede usando modelos de spins e fizemos a conexão destes com teorias quânticas de campos discretizadas que mantêm a invariância de calibre local.

Fizemos uma revisão do propagador do glúon no contínuo e sua conexão com o problema do confinamento. Apresentamos o propagador discretizado e os resultados já encontrados na literatura. Conceitos de simulação foram discutidos com vistas a sua aplicação eficiente neste problema.

É verificado o decréscimo do propagador do glúon para $p \lesssim 350 \text{ MeV}$. Nossos resultados indicam que o propagador do glúon tende a um valor finito no limite de volume infinito, não sendo, no entanto, descartada a possibilidade de que nesse limite ele se anule, como previsto no cenário de Gribov e Zwanziger. Formas analíticas conhecidas ajustaram-se bem aos dados, indicando a inexistência de pólos reais e o provável aparecimento de pólos imaginários no propagador do glúon. A função de Schwinger assume valores negativos, indicando violação da positividade na teoria YM_3^2 . Interpretamos estes comportamentos como sinalizações de confinamento.

Variando volume, topologia e número de nós verificamos que a paralelização de nosso programa é bastante boa, indicando que este tipo de aplicação é viável para pilhas de pc's.

As análises de efeito de volume finito indicam que redes ainda maiores são necessárias para acessar com mais precisão o valor do propagador em momentum nulo. Planejamos fazer simulações em redes de até 260^3 , mas para isso precisamos utilizar um algoritmo global de fixação numérica de calibre, a parte computacionalmente mais pesada de nossas simulações.

Trazemos a expectativa de estender nossos cálculos para quatro dimensões e grupo de calibre $SU(3)$, que é o quadro mais realístico, mas, como já expressado, entendemos que qualitativamente não existam diferenças essenciais para o caso estudado nesta tese. Extensão dos cálculos para temperatura finita podem ser feitos rapidamente. Queremos também analisar o propagador do fantasma e a influência de um condensado escalar na forma dos propagadores. Cálculos com férmions na rede são muito dispendiosos e só terão competitividade quando aplicados em problemas ainda não entendidos, como densidade finita, ou não muito explorados, como modelos fenomenológicos de hádrons [201–205] com os quais já temos alguma experiência [206–209].

Apêndice A

Notação e Convenções

Para estabelecer a notação revisamos as motivações geométricas que levam ao Lagrangiano de Yang-Mills; seguimos de perto a referência [22]. Trabalhamos no espaço Euclidiano cuja métrica $g_{E\mu\nu} = \delta_{\mu\nu}$, não existindo razão em diferenciar índices superescritos e subscritos já que

$$v_\mu v^\mu = g_{E\mu\nu} v^\nu v^\mu = v^\mu v^\mu = v_\mu v_\mu. \quad (\text{A.1})$$

Consideremos um campo vetorial complexo $\phi(x)$

$$\phi(x) \equiv \begin{pmatrix} \phi^1(x) \\ \phi^2(x) \\ \dots \\ \phi^N(x) \end{pmatrix} \quad (\text{A.2})$$

$\phi^i(x)$ cujas N componentes são campos escalares complexos. A cada ponto do espaço-tempo está associado um espaço vetorial V_x do qual $\phi(x)$ faz parte (x serve como uma etiqueta do espaço vetorial). Em cada V_x define-se o produto escalar na forma

$$\phi(x) \cdot \phi'(x) \equiv \sum_i^N \phi'^{i*}(x) \phi^i(x) . \quad (\text{A.3})$$

Com as definições acima, notamos que a ação

$$S = \int d^d x \{ \partial_\mu \phi(x) \cdot \partial_\mu \phi(x) + m^2 \phi(x) \cdot \phi(x) + F(\phi(x) \cdot \phi(x)) \} \quad (\text{A.4})$$

é invariante frente a uma mudança de base (sentido passivo) ou rotação (sentido ativo) do tipo

$$\phi'(x) = \Lambda^{-1} \phi(x) , \quad (\text{A.5})$$

onde Λ é uma matriz $N \times N$ tal que

$$i) \quad \Lambda^\dagger \Lambda = 1 ; \quad (\text{A.6})$$

$$ii) \quad \det \Lambda = 1 ; \quad (\text{A.7})$$

estas duas condições definem as matrizes do grupo $SU(N)$, enquanto que tomando apenas (A.6) temos as matrizes do grupo $U(N)$.

Em 1953 C. N. Yang e R. L. Mills [210] questionaram-se sobre as limitações de ações do tipo (A.4) serem invariantes apenas frente a mudanças de base globais e analisaram o caso $SU(2)$ em que a matriz de rotação dependesse de sua posição no espaço-tempo, ou seja,

$$\Lambda \rightarrow \Lambda(x) \quad ; \quad (\text{A.8})$$

a partir daí eles elaboraram uma teoria, *não-abeliana*, na qual as bases dos espaços vetoriais locais V_x podem mudar independentemente: este tipo de teoria ficou desde então conhecida como *teoria de Yang-Mills*.

Quando a ação é independente frente a rotações globais dizemos que o sistema sofreu uma *transformação de calibre global ou de primeira espécie*; quando as rotações são locais, do tipo $\Lambda(x)$, estamos nos referindo a *transformações de calibre locais ou de segunda espécie*. Esta exigência da invariância da Física frente a mudanças locais de base lembra muito a relatividade geral e, baseados nesta analogia, construiremos o Lagrangiano de Yang-Mills através de interpretação geométrica. Neste processo muitos dos conceitos usados na rede euclidiana aparecem naturalmente.

Como temos um espaço vetorial para cada ponto do espaço-tempo precisamos desenvolver um procedimento que conecte dois espaços vetoriais vizinhos V_x e V_{x+dx} . Isto é feito através do conceito de *transporte paralelo* e *diferenciação covariante* os quais permitirão a comparação entre vetores destes espaços-vetoriais.

Consideremos uma curva \mathcal{C}_{yx} conectando dois pontos x e y :

$$c^\mu(s) \in \mathcal{C}_{yx}, \quad s \in [0, 1] \quad (\text{A.9})$$

tal que $c^\mu(0) = x^\mu$ e $c^\mu(1) = y^\mu$. Associamos uma matriz a esta curva $U(\mathcal{C}_{yx})$ a qual mapeia V_x em V_y :

$$\phi(y) = U(\mathcal{C}_{yx})\phi(x) \quad ; \quad (\text{A.10})$$

$U(\mathcal{C}_{yx})$ é chamado *transportador paralelo*.

Suponhamos que façamos uma transformação de calibre local; temos então

$$\phi'(y) = \Lambda^{-1}(y)\phi(y) \quad (\text{A.11})$$

$$= \Lambda^{-1}(y)U(\mathcal{C}_{yx})\phi(x) \quad (\text{A.12})$$

$$= \Lambda^{-1}(y)U(\mathcal{C}_{yx})\Lambda(x)\phi'(x) \quad . \quad (\text{A.13})$$

Comparando esta identidade com (A.10) obtemos a lei de transformação do transportador paralelo:

$$U'(\mathcal{C}_{yx}) = \Lambda^{-1}(y)U(\mathcal{C}_{yx})\Lambda(x). \quad (\text{A.14})$$

Gostaríamos de saber como muda um vetor quando transportado para um outro espaço vetorial; no entanto, para fazer esta comparação precisamos estar no mesmo ponto. Para esta análise introduzimos a definição de diferencial covariante:

$$D\phi(x) \equiv \phi'(x) - \phi(x) \quad (\text{A.15})$$

o qual pode ser reescrito como

$$D\phi(x) = U^{-1}(\mathcal{C}_{x+dx,x})\phi(x + dx) - \phi(x). \quad (\text{A.16})$$

Sua expressão final depende, é claro, da forma do transportador paralelo entre dois pontos próximos x e $x + dx$; como são vizinhos, o transportador paralelo deve diferir infinitesimalmente da identidade

$$U(\mathcal{C}_{x+dx,x}) = 1 - A_\mu(x)dx^\mu , \quad (\text{A.17})$$

onde $A_\mu(x)$ é uma *matriz anti-hermitiana* elemento da álgebra dos geradores do grupo ao qual pertence o transportador paralelo; será chamado de *campo de calibre* por razões vindouras. Substituindo esta expressão em (A.16) e lembrando que

$$\phi(x + dx) = \phi(x) + \partial_\mu \phi(x)dx^\mu + \mathcal{O}(dx^2) , \quad (\text{A.18})$$

temos

$$D\phi(x) = D_\mu \phi(x)dx^\mu , \quad (\text{A.19})$$

onde

$$D_\mu \phi(x) = (\partial_\mu + A_\mu(x))\phi(x) , \quad (\text{A.20})$$

é a derivada covariante.

Podemos encontrar o comportamento dos campos de calibre A_μ sob uma transformação de calibre a partir da substituição de (A.17) em (A.14):

$$A'_\mu(x) = \Lambda^{-1} A_\mu(x)\Lambda(x) - (\partial_\mu \Lambda^{-1}(x))\Lambda(x) . \quad (\text{A.21})$$

Usando a expressão acima podemos também encontrar que

$$D'_\mu \phi'(x) = \Lambda^{-1}(x)D_\mu \phi(x) , \quad (\text{A.22})$$

de onde fica claro o nome de derivada covariante (se transforma como a definição de mudança de base (A.11)).

Outra quantidade interessante sai do conceito de transportador ao longo de uma curva fechada:

$$\phi'(x) = U(\mathcal{C}_{xx})\phi(x) . \quad (\text{A.23})$$

É claro que $U(\mathcal{C}_{xx})$ indica o grau de curvatura deste espaço abstrato, como sugere a figura A.1. É interessante então calcular a expressão para esta quantidade num caminho fechado infinitesimal:

$$U(\mathcal{C}_{xx}) \equiv U(\mathcal{C}_{x,x+dy})U(\mathcal{C}_{y-dx,y})U(\mathcal{C}_{y,y-dy})U(\mathcal{C}_{x+dx,x}) . \quad (\text{A.24})$$

Usando (A.17) obtemos

$$U(\mathcal{C}_{xx}) = 1 - F_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu , \quad (\text{A.25})$$

onde

$$F_{\mu\nu}(x) = \partial_\mu A_\nu(x) - \partial_\nu A_\mu(x) + [A_\mu(x), A_\nu(x)] . \quad (\text{A.26})$$

é chamado de *tensor de força*¹. A analogia com a relatividade geral também vale neste ponto, pois lá o tensor de Riemann-Christoffel, do qual se tira a curvatura, é encontrado a partir do comutador das derivadas covariantes; em nosso caso temos também que

$$[D_\mu, D_\nu] = F_{\mu\nu} . \quad (\text{A.27})$$

¹ *Strength tensor.*

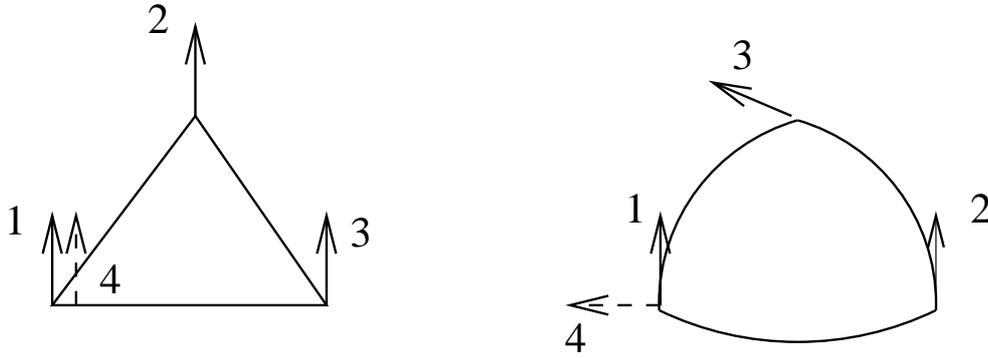


Fig. A.1: *Curvatura.*

Multiplicando (A.25) à esquerda por $\Lambda(x)^{-1}$, à direita por $\Lambda(x)$ e usando a lei de transformação (A.14) obtemos

$$F'_{\mu\nu}(x) = \Lambda^{-1}(x)F_{\mu\nu}(x)\Lambda(x) . \quad (\text{A.28})$$

Da identidade acima se conclue que a grandeza mais simples, invariante de calibre, que envolva apenas campos de calibre é

$$\text{Tr}(F_{\mu\nu}F_{\mu\nu}) . \quad (\text{A.29})$$

Tendo em mente a relação (A.22), percebemos que uma ação do tipo (A.4), onde as derivadas comuns são substituídas por derivadas covariantes, é *invariante sob transformações de calibre locais*, como queríamos. Ademais, como a derivada covariante contém um termo dependente do espaço-tempo, o campo de calibre A_μ , precisamos adicionar à ação um termo proporcional a (A.29), o qual será responsável pela dinâmica deste novo campo.

Outra coisa interessante que esta abordagem geométrica nos traz é a possibilidade de encontrar o transportador paralelo dado o campo de calibre. Consideremos novamente uma curva arbitrária \mathcal{C}_{yx} parametrizada como em (A.9); queremos investigar como varia U com s:

$$U(\mathcal{C}_{c(s+ds),x}) = U(\mathcal{C}_{c(s+ds),c(s)})U(\mathcal{C}_{c(s),x}) . \quad (\text{A.30})$$

Como

$$c^\mu(s + ds) = c^\mu(s) + \frac{dc^\mu(s)}{ds}ds + \mathcal{O}(ds^2) \quad (\text{A.31})$$

temos, usando (A.17), que

$$U(\mathcal{C}_{c(s+ds),x}) = \left(1 - A_\mu(c(s))\frac{dc^\mu(s)}{ds}ds\right)U(\mathcal{C}_{c(s),x}) , \quad (\text{A.32})$$

$$U(\mathcal{C}_{c(s+ds),x}) - U(\mathcal{C}_{c(s),x}) = -A_\mu(c(s))\frac{dc^\mu(s)}{ds}U(\mathcal{C}_{c(s),x})ds , \quad (\text{A.33})$$

ou

$$\frac{dU(\mathcal{C}_{c(s),x})}{ds} = -A_\mu(c(s))\frac{dc^\mu(s)}{ds}U(\mathcal{C}_{c(s),x}) . \quad (\text{A.34})$$

A solução desta equação é a bem conhecida fórmula de Dyson

$$U(\mathcal{C}_{c(s),x}) = P[\exp(-\int_0^s A_\mu(c(s)) \frac{dc^\mu(s)}{ds} ds)] \quad (\text{A.35})$$

$$= P[\exp(-\int_{\mathcal{C}_{c(s)}} A_\mu(y) dy_\mu)] , \quad (\text{A.36})$$

onde o operador P é definido através de

$$P[A_\mu(c(s_a))A_\mu(c(s_b))] \equiv \begin{cases} A_\mu(c(s_a))A_\mu(c(s_b)), & s_a > s_b \\ A_\mu(c(s_b))A_\mu(c(s_a)), & s_a < s_b \end{cases} \quad (\text{A.37})$$

Notamos que (A.36) é a *integral de Schwinger* usada no capítulo 1. É interessante analisar como esta expressão fica para o caso em que o caminho é uma reta ligando x a $x+a$, com a pequeno. Suponhamos que a reta esteja na direção $\hat{1}$; assim a curva é parametrizada por

$$c^\mu(s) = x^\mu + sa\delta^{\mu 1} , \quad (\text{A.38})$$

o que leva a

$$\frac{dc^\mu(s)}{ds} = a\delta^{\mu 1} . \quad (\text{A.39})$$

Além disso, podemos expandir o campo de calibre em potências de a :

$$A_\mu(x^\mu + sa\delta^{\mu 1}) = A_\mu(x^\mu) + \left. \frac{dA_\mu(x^\mu + sa\delta^{\mu 1})}{da} \right|_{a=0} a s\delta_{\mu 1} + \mathcal{O}(a^2) . \quad (\text{A.40})$$

Substituindo (A.39) e (A.40) em (A.36) obtemos

$$U(\mathcal{C}_{x+\hat{1},x}) \simeq P[\exp(-aA_\mu(x))] . \quad (\text{A.41})$$

Após esta discussão geral, a qual vale para grupos $U(N)$ e $SU(N)$, vamos especificar com mais detalhes o último caso, em especial para $SU(2)$. Tanto $F_{\mu\nu}$ quanto A_μ pertencem à álgebra $\mathfrak{su}(N)$, ou seja,

$$\begin{aligned} A_\mu &\equiv -igA_\mu^a T^a , \\ F_{\mu\nu} &= -igF_{\mu\nu}^a T^a , \end{aligned} \quad (\text{A.42})$$

onde T^a são os $N^2 - 1$ geradores da álgebra $\mathfrak{su}(N)$ definida por

$$[T^a, T^b] = if^ab_c T^c \quad (\text{A.43})$$

(f^ab_c é a constante de estrutura do grupo). Os geradores estão normalizados de acordo com

$$Tr(T^a T^b) = \frac{1}{2} \delta^{ab} . \quad (\text{A.44})$$

e para o caso $SU(2)$ os 3 geradores são dados por

$$T_a = \frac{\tau_a}{2}, \quad a = 1, 2, 3 , \quad (\text{A.45})$$

onde τ_a são as matrizes de Pauli:

$$\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} \quad \tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} . \quad (\text{A.46})$$

É interessante escrever $F_{\mu\nu}^a$ em termos de A_μ^a ; de (A.26) e (A.42)

$$-igF_{\mu\nu}^a T_a = -ig\partial_\mu A_\nu^a T^a + ig\partial_\nu A_\mu^a T^a - g^2 A_\mu^a A_\nu^b [T^a, T^b] \quad (\text{A.47})$$

$$F_{\mu\nu}^a T_a = \partial_\mu A_\nu^a T^a - \partial_\nu A_\mu^a T^a - igA_\mu^a A_\nu^b (if_{abc} T^c) \quad (\text{A.48})$$

Multiplicando os dois lados por T^d e tomando o traço temos, usando a condição de normalização (A.44),

$$F_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + f_{abc} g A_\mu^b(x) A_\nu^c(x) . \quad (\text{A.49})$$

Podemos agora finalmente escrever a ação para a teoria pura de Yang-Mills

$$S = \int d^d x \mathcal{L}_{YM} = -\frac{1}{2g^2} \int d^d x \text{Tr}(F_{\mu\nu} F_{\mu\nu}) = \frac{1}{4} \int d^d x F_{\mu\nu}^a F_{\mu\nu}^a . \quad (\text{A.50})$$

Por construção o Lagrangiano acima é invariante frente a transformações de calibre locais $\Lambda(x) \in SU(N)$. Devido a (A.49) a dinâmica deste Lagrangiano inclui auto-interações cúbicas e quárticas entre os bósons de calibre.

Para que a ação fique com dimensão de massa nula teremos que ter as seguintes unidades para os componentes de (A.50):

$$[F_{\mu\nu}^a] = \frac{d}{2} , \quad (\text{A.51})$$

$$[A_\mu^a] = \frac{d-2}{2} , \quad (\text{A.52})$$

$$[g] = \frac{4-d}{2} . \quad (\text{A.53})$$

A última identidade é interessante, pois indica que para $d \leq 3$ a teoria é superrenormalizável. Na rede, as grandezas acima são em geral colocadas em forma adimensional, ou seja,

$$\hat{F}_{\mu\nu}^a = F_{\mu\nu}^a a^{\frac{d}{2}} , \quad (\text{A.54})$$

$$\hat{A}_\mu^a = A_\mu^a a^{\frac{d-2}{2}} , \quad (\text{A.55})$$

$$\hat{g}^2 = g^2 a^{4-d} . \quad (\text{A.56})$$

Os casos bi e tri-dimensionais nos interessarão mais:

- 1 + 1

$$\hat{F}_{\mu\nu}^a = F_{\mu\nu}^a a , \quad (\text{A.57})$$

$$\hat{A}_\mu^a = A_\mu^a , \quad (\text{A.58})$$

$$\hat{g}^2 = g^2 a^2 . \quad (\text{A.59})$$

- 2 + 1

$$\hat{F}_{\mu\nu}^a = F_{\mu\nu}^a a^{\frac{3}{2}}, \quad (\text{A.60})$$

$$\hat{A}_\mu^a = A_\mu^a a^{\frac{1}{2}}, \quad (\text{A.61})$$

$$\hat{g}^2 = g^2 a. \quad (\text{A.62})$$

Apêndice B

Detalhes de contas

B.1 Integrais para modelo solúvel

Interessa-nos calcular

$$z(\beta) = \int dW \exp \left(\frac{\beta}{4} \text{Tr}(W + W^\dagger) \right) ; \quad (\text{B.1})$$

usando que a medida de Haar dW em $SU(2)$ é dada por

$$dW = \frac{1}{\pi^2} \delta(w_0 + |\vec{w}|^2 - 1) d^4 w , \quad (\text{B.2})$$

temos

$$z(\beta) = \frac{1}{\pi^2} \int d^4 w \delta(w_0 + |\vec{w}|^2 - 1) e^{\beta w_0} \quad (\text{B.3})$$

$$= \frac{1}{\pi^2} \int \frac{d^3 \vec{w}}{2\sqrt{1-|\vec{w}|^2}} \int dw_0 e^{\beta w_0} \left\{ \delta(w_0 - \sqrt{1-|\vec{w}|^2}) \right. \quad (\text{B.4})$$

$$\left. + \delta(w_0 + \sqrt{1-|\vec{w}|^2}) \right\} \theta(1-|\vec{w}|^2) \quad (\text{B.5})$$

$$= \frac{1}{\pi^2} \int \frac{d^3 \vec{w}}{\sqrt{1-|\vec{w}|^2}} \cosh(\beta \sqrt{1-|\vec{w}|^2}) \theta(1-|\vec{w}|^2) \quad (\text{B.6})$$

$$= \frac{1}{\pi^2} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_0^1 \frac{\sin \theta d\theta d\phi r^2 dr}{\sqrt{1-r^2}} \cosh(\beta \sqrt{1-r^2}) \quad (\text{B.7})$$

$$= \frac{4}{\pi} \int_0^1 \frac{r^2 dr}{\sqrt{1-r^2}} \cosh(\beta \sqrt{1-r^2}) . \quad (\text{B.8})$$

Fazendo a mudança de variáveis $u = \sqrt{1-r^2}$ obtemos

$$z(\beta) = \frac{4}{\pi} \int_0^1 du \sqrt{1-u^2} \cosh(\beta u) . \quad (\text{B.9})$$

Para prosseguirmos precisamos de uma tabela de integrais: em [211] encontramos (identidade 3.387(1)) que $z(\beta)$ está relacionada à representação integral das funções modificadas de Bessel $I_\nu(\mu)$:

$$\int_{-1}^{+1} dx (1-x^2)^{\nu-1} e^{-\mu x} = \sqrt{\pi} \left(\frac{2}{\mu} \right)^{\nu-\frac{1}{2}} \Gamma(\nu) I_{\nu-\frac{1}{2}}(\mu) . \quad (\text{B.10})$$

Para $\nu = 3/2$ temos:

$$\int_{-1}^{+1} dx \sqrt{1-x^2} e^{-\mu x} = \int_{-1}^0 dx \sqrt{1-x^2} e^{-\mu x} + \int_0^1 dx \sqrt{1-x^2} e^{-\mu x} \quad (\text{B.11})$$

$$= 2 \int_0^1 dx \sqrt{1-x^2} \cosh(\mu x) \quad (\text{B.12})$$

$$= \sqrt{\pi} \left(\frac{2}{\mu} \right) \Gamma(3/2) I_1(\mu) = \frac{\pi}{\mu} I_1(\mu) \quad (\text{B.13})$$

e, portanto,

$$\int_0^1 dx \sqrt{1-x^2} \cosh(\mu x) = \frac{\pi I_1(\mu)}{2\mu}. \quad (\text{B.14})$$

Introduzindo (B.14) em (B.9) conseguimos

$$z(\beta) = \frac{2I_1(\beta)}{\beta}. \quad (\text{B.15})$$

A partir da expressão (B.15) podemos deduzir outros valores esperados. Por exemplo, também nos interessa calcular

$$\hat{w}(\beta) \equiv w(\beta) z(\beta) = \int dW \frac{1}{2} \text{Tr} W \exp \frac{\beta}{4} \text{Tr}(W + W^\dagger); \quad (\text{B.16})$$

é fácil ver $\hat{w}(\beta)$ pode ser gerada através de derivadas de $z(\beta)$:

$$\hat{w}(\beta) = \int dW w_0 e^{\beta w_0} \quad (\text{B.17})$$

$$= \frac{d}{d\beta} \int dW e^{\beta w_0} \quad (\text{B.18})$$

$$= \frac{d z(\beta)}{d\beta}. \quad (\text{B.19})$$

Usando a identidade

$$I_2(\mu) = \frac{dI_1(\mu)}{d\mu} - \frac{I_1(\mu)}{\mu}, \quad (\text{B.20})$$

temos que

$$\hat{w}(\beta) = \frac{2I_2(\beta)}{\beta}. \quad (\text{B.21})$$

Reexpressando a identidade acima para $w(\beta)$ e usando (B.15) chegamos a

$$w(\beta) = \frac{I_2(\beta)}{I_1(\beta)}. \quad (\text{B.22})$$

B.2 Propriedades do gerador funcional

Um funcional

$$I = \int \mathcal{D}\phi F[\phi(x)] \quad (\text{B.23})$$

é entendido como a soma das avaliações de $F[\phi(x)]$ em todas as funções da coleção $\phi(x)$ das funções quadraticamente integráveis. Assim, uma mudança de variável do tipo

$$\phi(x) \rightarrow \chi(x) = \phi(x) + \epsilon h(x) \quad (\text{B.24})$$

não altera o valor de I, já que a coleção $\phi(x)$ equivale a $\chi(x)$. Temos então

$$\int \mathcal{D}\phi F[\phi(x)] = \int \mathcal{D}\phi F[\phi(x) + \epsilon h(x)] . \quad (\text{B.25})$$

Expandindo $F[\phi(x) + \epsilon h(x)]$ obtemos

$$F[\phi(x) + \epsilon h(x)] = F[\phi] + \epsilon \int d^d x \frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi} h(x) + \mathcal{O}(\epsilon^2) . \quad (\text{B.26})$$

Substituindo em (B.25) e igualando os coeficientes de mesma potência de ϵ ficamos com

$$\int \mathcal{D}\phi \int d^d x \frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi} h(x) = 0 , \quad (\text{B.27})$$

$$\int d^d x h(x) \int \mathcal{D}\phi \frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi} = 0 . \quad (\text{B.28})$$

Como $h(x)$ é arbitrária temos no caso geral

$$\int \mathcal{D}\phi \frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi} = 0, \quad (\text{B.29})$$

ou seja, *a integral funcional de uma derivada funcional é zero.*

Vejamos um caso mais geral: façamos uma mudança de variável infinitesimal

$$\phi(x) = \chi(x) + \epsilon G(\chi, x) \quad (\text{B.30})$$

no funcional gerador das funções de Green totais. Temos que

$$\begin{aligned} Z[J] &= \int \mathcal{D}\chi(x) \left(1 + \epsilon \int d^d x \frac{\delta G(\chi, x)}{\delta \chi(x)} + \mathcal{O}(\epsilon^2) \right) \\ &\times \exp \left[-S[\chi(x)] + \epsilon \frac{\delta S}{\delta \chi} G(\chi, x) + \mathcal{O}(\epsilon^2) + \int d^d x J(x) \chi(x) + \epsilon \int d^d x J(x) G(\chi, x) \right] \\ &= \int \mathcal{D}\chi(x) \left(1 + \epsilon \int d^d x \frac{\delta G(\chi, x)}{\delta \chi(x)} \right) \\ &\times \left(1 + \epsilon \int d^d x \left[\frac{\delta S}{\delta \chi} + J(x) \right] G(\chi, x) \right) \exp \left[-S[\chi(x)] + \int d^d x J(x) \chi(x) \right] \\ &= \int \mathcal{D}\chi(x) \left(1 + \epsilon \int d^d x \frac{\delta G(\chi, x)}{\delta \chi(x)} \right. \\ &+ \left. \epsilon \int d^d x \left[\frac{\delta S}{\delta \chi} + J(x) \right] G(\chi, x) \right) \exp \left[-S[\chi(x)] + \int d^d x J(x) \chi(x) \right] . \end{aligned} \quad (\text{B.31})$$

O termo correspondente à multiplicação por 1 vai produzir um $Z[J]$ do lado direito da equação o qual se cancela com o do lado esquerdo. Assim, a expressão acima pode ser reescrita como

$$\int d^d x \left[\left(\frac{\delta S}{\delta \chi} \left(\frac{\delta}{\delta J} \right) + J(x) \right) G \left(\frac{\delta}{\delta J}, x \right) + \frac{\delta G}{\delta \chi} \left(\frac{\delta}{\delta J}, x \right) \right] Z[J] = 0 . \quad (\text{B.32})$$

O segundo termo do lado esquerdo se cancela, devido a (B.29); sobra-nos

$$\int d^d x G \left(\frac{\delta}{\delta J}, x \right) \left[\left(\frac{\delta S}{\delta \chi} \left(\frac{\delta}{\delta J} \right) + J(x) \right) \right] Z[J] = 0 . \quad (\text{B.33})$$

O exemplo trivial é para o caso de $G(1, x) = f(x)$, ou seja, uma translação funcional; da expressão acima encontramos

$$\left[\left(\frac{\delta S}{\delta \chi} \left(\frac{\delta}{\delta J} \right) + J(x) \right) \right] Z[J] = 0 , \quad (\text{B.34})$$

relação típica das usadas na dedução das equações de Dyson-Schwinger. Para $G(\chi, x)$ envolvendo a matriz de Faddeev-Popov obtemos as identidade de Slavnov-Taylor.

B.3 Forma geral para o propagador do glúon

Todo tensor no espaço de momentum pode ser decomposto em uma parte transversal e outra longitudinal

$$D^{\mu\nu}(k) = A(k^2) T^{\mu\nu} + B(k^2) L^{\mu\nu} , \quad (\text{B.35})$$

onde

$$T^{\mu\nu} = \delta^{\mu\nu} - \frac{k^\mu k^\nu}{k^2} , \quad (\text{B.36})$$

$$L^{\mu\nu} = \frac{k^\mu k^\nu}{k^2} . \quad (\text{B.37})$$

Similarmente, a inversa de $D^{\mu\nu}(k)$ pode ser expressa como

$$D^{-1\mu\nu}(k) = A'(k^2) T^{\mu\nu} + B'(k^2) L^{\mu\nu} . \quad (\text{B.38})$$

Sabendo que

$$D^{\mu\nu}(k) D^{-1\nu\rho}(k) = \delta^{\mu\rho} , \quad (\text{B.39})$$

temos

$$A(k^2) = \frac{1}{A'(k^2)} , \quad (\text{B.40})$$

$$B(k^2) = \frac{1}{B'(k^2)} , \quad (\text{B.41})$$

onde usamos $T^{\mu\nu}T^{\nu\rho} = T^{\mu\rho}$, $L^{\mu\nu}L^{\nu\rho} = L^{\mu\rho}$ e $T^{\mu\nu}L^{\nu\rho} = 0$. Portanto, podemos obter trivialmente $D^{\mu\nu}(k)$ a partir de sua inversa

$$D^{\mu\nu}(k) = \frac{1}{A'(k^2)} T^{\mu\nu} + \frac{1}{B'(k^2)} L^{\mu\nu} . \quad (\text{B.42})$$

No caso do propagador do glúon, por exemplo, a EDS é dada por

$$D^{-1ab}_{\mu\nu}(x, y) = \left[-\delta_{\mu\nu} \partial_\rho \partial^\rho + \left(1 - \frac{1}{\xi} \right) \partial_\mu^x \partial_\nu^y \right] \delta^{ab} \delta^{(d)}(x - y) + \Pi_{\mu\nu}^{ab}(x, y) ; \quad (\text{B.43})$$

onde $\Pi_{\mu\nu}^{ab}(x, y)$ é o *tensor de polarização do glúon*; no espaço de momentum esta EDS é dada por

$$D^{-1ab}_{\mu\nu}(k) = \delta^{ab} \left[k^2 \delta_{\mu\nu} - \left(1 - \frac{1}{\xi} \right) k_\mu k_\nu \right] + \Pi_{\mu\nu}^{ab}(k) . \quad (\text{B.44})$$

Decompondo a polarização em suas componentes longitudinais e transversais

$$\Pi_{\mu\nu}^{ab}(k) = \delta^{ab} \left(\Pi_T(k^2) T_{\mu\nu} + \Pi_L(k^2) L_{\mu\nu} \right) , \quad (\text{B.45})$$

reescrevemos (B.44) como

$$D^{-1ab}_{\mu\nu}(k) = \delta^{ab} \left[(k^2 + \Pi_T) T_{\mu\nu} + (k^2/\xi + \Pi_L) L_{\mu\nu} \right] , \quad (\text{B.46})$$

o que equivale a

$$D_{\mu\nu}^{ab}(k) = \delta^{ab} \left[\frac{1}{k^2 + \Pi_T} T_{\mu\nu} + \frac{1}{k^2/\xi + \Pi_L} L_{\mu\nu} \right] . \quad (\text{B.47})$$

A identidade de Slavnov-Taylor

$$-\partial_\mu^x \partial_\nu^y D_{\mu\nu}^{ab}(x - y) = \xi \delta^{(d)}(x - y) \quad (\text{B.48})$$

é escrita no espaço de momenta como

$$k_\mu k_\nu D_{\mu\nu}^{ab}(k) = \xi ; \quad (\text{B.49})$$

substituindo (B.47) na expressão acima obtemos que $\Pi_L = 0$. Portanto, a forma geral para o propagador do glúon fica

$$D_{\mu\nu}^{ab}(k) = \delta^{ab} \left[\frac{1}{k^2 + \Pi_T} T_{\mu\nu} + \frac{\xi}{k^2} L^{\mu\nu} \right] , \quad (\text{B.50})$$

ou, mais explicitamente,

$$D_{\mu\nu}^{ab}(k) = \delta^{ab} \left[\left(\delta_{\mu\nu} - \frac{k_\mu k_\nu}{k^2} \right) D(k^2) + \xi \frac{k_\mu k_\nu}{k^4} \right] , \quad (\text{B.51})$$

com

$$D(k^2) \equiv \frac{1}{k^2 + \Pi_T} . \quad (\text{B.52})$$

Como a polarização só possui a parte transversal, se diz que a interação desacopla da componente longitudinal do glúon.

B.4 Propagador do glúon na rede no espaço de momenta

Seja o propagador do glúon na rede uma função de dois pontos, x e y pertencentes a uma rede euclidiana de tamanho $(Na)^d$:

$$D_{\mu\nu}^{bc}(x-y) \equiv \langle A_\mu^a(x) A_\nu^b(y) \rangle . \quad (\text{B.53})$$

Esta função pode ser expandida em série de Fourier na seguinte forma (ver (B.141) e (B.142))

$$D_{\mu\nu}^{bc}(x-y) = \frac{1}{V} \sum_k e^{ik \cdot (x-y)} \delta^{bc} D_{\mu\nu}(k) , \quad (\text{B.54})$$

com

$$k_\mu = \frac{2\pi}{N_\mu} n_\mu, \quad n_\mu = 0, 1, 2, \dots, N-1 \quad (\text{B.55})$$

$$V = (Na)^d . \quad (\text{B.56})$$

A dimensão de $D_{\mu\nu}^{bc}(x-y)$ é $d-2$; assim $[D_{\mu\nu}^{bc}(k)] = -2$. Decompõe-se o lado direito de (B.54) como [117] :

$$\frac{1}{V} \delta^{bc} \left[D(0) \delta_{\mu\nu} + \sum_{k \neq 0} e^{ik \cdot (x-y)} D(k) P_{\mu\nu} \right] , \quad (\text{B.57})$$

onde

$$P_{\mu\nu} \equiv \delta_{\mu\nu} - \frac{\sin(k_\mu/2) \sin(k_\nu/2)}{\sum_\lambda \sin^2(k_\lambda/2)} \quad (\text{B.58})$$

é a versão discretizada do projetor transversal $\delta_{\mu\nu} - k_\mu k_\nu / k^2$. Somando sobre x e y em ambos os lados de (B.57) obtém-se:

$$\left\langle \sum_{x,y} A_\mu^a(x) A_\nu^b(y) \right\rangle = \frac{1}{V} \delta^{bc} \left[D(0) \delta_{\mu\nu} \sum_{x,y} + \sum_{k \neq 0} D(k) P_{\mu\nu} \sum_{x,y} e^{ik \cdot (x-y)} \right] . \quad (\text{B.59})$$

Usando que $\sum_x = N^d$ e $\sum_x e^{ik \cdot x} = N^d \delta^{(d)}(k)$ a equação acima fica

$$\delta^{bc} \delta_{\mu\nu} D(0) = \frac{a^d}{N^d} \left\langle \sum_{x,y} A_\mu^a(x) A_\nu^b(y) \right\rangle . \quad (\text{B.60})$$

Multiplicando ambos os lados por δ^{bc} e $\delta_{\mu\nu}$ ficamos com¹

$$(\mathcal{N}^2 - 1) d D(0) = \frac{a^d}{N^d} \left\langle \sum_{x,y} A_\mu^a(x) A_\mu^a(y) \right\rangle \quad (\text{B.61})$$

ou

$$D(0) = \frac{a^d}{(\mathcal{N}^2 - 1) d N^d} \left\langle \left[\sum_x A_\mu^a(x) \right]^2 \right\rangle . \quad (\text{B.62})$$

¹ Nesta seção, denotamos o número de cores por \mathcal{N} .

Em YM_3^2 a expressão para momentum zero acima fica

$$D(0) = \frac{a^6}{9V} \left\langle \left[\sum_x A_\mu^a(x) \right]^2 \right\rangle. \quad (B.63)$$

Para obter $D(k)$ para momentum não-nulo o procedimento é similar: multiplica-se ambos os lados de (B.57) por $e^{-iq \cdot (x-y)}$ com $q \neq 0$ e soma-se sobre x e y para obter

$$\left\langle \sum_{x,y} A_\mu^a(x) A_\nu^b(y) \right\rangle e^{-iq \cdot (x-y)} = \delta^{bc} \frac{a^d}{N^d} D(q) P_{\mu\nu}. \quad (B.64)$$

Usando a identidade

$$\delta_{\mu\nu} P_{\mu\nu} = d - 1, \quad (B.65)$$

podemos reescrever (B.64) como

$$\begin{aligned} D(q) &= \frac{a^d}{(\mathcal{N}^2 - 1)(d - 1)N^d} \left\langle \left[\sum_x A_\mu^b(x) e^{-iq \cdot x} \right] \left[\sum_y A_\mu^b(y) e^{iq \cdot y} \right] \right\rangle \\ &= \frac{a^d}{(\mathcal{N}^2 - 1)(d - 1)N^d} \left\langle \left[\sum_x A_\mu^b(x) \cos(q \cdot x) \right]^2 + \left[\sum_x A_\mu^b(x) \sin(q \cdot x) \right]^2 \right\rangle, \end{aligned} \quad (B.66)$$

que para YM_3^2 fica

$$D(q) = \frac{a^6}{6V} \left\langle \left[\sum_x A_\mu^b(x) \cos(q \cdot x) \right]^2 + \left[\sum_x A_\mu^b(x) \sin(q \cdot x) \right]^2 \right\rangle. \quad (B.67)$$

Para colocar as fórmulas (B.63) e (B.67) em forma adimensional (notação do chapéu) basta lembrar que $\hat{D}(k) = D(k)/a^2$.

B.5 Funcional de elos e Calibre de Landau

Para uma dada configuração de elos $\{U_\mu(x)\}$ queremos encontrar uma transformação de calibre $\{g(x)\}$ que minimize o funcional

$$\mathcal{E}_U[g] \equiv 1 - \frac{a^d}{2dV} \sum_{\mu=1}^d \sum_x \frac{1}{2} \text{Tr} [g(x) U_\mu(x) g^\dagger(x + \hat{\mu}) + g^\dagger(x + \hat{\mu}) U_\mu^\dagger(x) g^\dagger(x)]. \quad (B.68)$$

Para tanto parametrizamos um sub-grupo de $SU(N)$ através de um parâmetro τ

$$g(\tau; x) \equiv \exp[\tau \gamma(x)], \quad (B.69)$$

$$\gamma(x) \equiv i\gamma^b(x) T^b, \quad (B.70)$$

de forma que $\mathcal{E}_U[g]$ possa ser considerado uma função de τ . Com esta parametrização reescrevemos (B.68) como

$$\mathcal{E}_U[g(\tau)] \equiv 1 - \frac{a^d}{2dV} \sum_{\mu=1}^d \sum_x \text{Tr} (g(\tau; x) U_\mu(x) g^\dagger(\tau; x + e_\mu)) . \quad (\text{B.71})$$

Derivando $\mathcal{E}_U[g]$ em relação a τ obtemos

$$\begin{aligned} \mathcal{E}'_U[g(\tau)] &= -\frac{a^d}{2dV} \sum_{\mu=1}^d \sum_x \text{Tr} (\gamma(x; \tau) g(\tau; x) U_\mu(x) g^\dagger(\tau; x + \hat{\mu}) \\ &\quad - g(\tau; x) U_\mu(x) g^\dagger(x + \hat{\mu}) \gamma(x + \mu; \tau)) \end{aligned} \quad (\text{B.72})$$

$$\begin{aligned} &= -\frac{a^d}{2dV} \sum_{\mu=1}^d \sum_x \text{Tr} (\gamma(x; \tau) g(\tau; x) U_\mu(x) g^\dagger(\tau; x + \hat{\mu}) \\ &\quad - g(\tau; x - \hat{\mu}) U_\mu(x - \hat{\mu}) g^\dagger(x) \gamma(x; \tau)) \end{aligned} \quad (\text{B.73})$$

$$\begin{aligned} &= -\frac{a^d}{2dV} \sum_x \text{Tr} \left[\gamma(x; \tau) \left(\sum_{\mu=1}^d (g(\tau; x) U_\mu(x) g^\dagger(x + \hat{\mu}) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - g(\tau; x - \hat{\mu}) U_\mu(x - \hat{\mu}) g^\dagger(x)) \right) \right] . \end{aligned} \quad (\text{B.74})$$

Definindo o termo entre parênteses como $F(x; \tau)$, reescrevemos a expressão acima como

$$\mathcal{E}'_U[g(\tau)] = -\frac{a^d}{2dV} \sum_x i\gamma^b(x) \text{Tr} (T^b F(x; \tau)) \quad (\text{B.75})$$

$$= \frac{a^d}{dV} \sum_x \gamma^b(x; \tau) F^b(x; \tau) , \quad (\text{B.76})$$

onde

$$F^b(x; \tau) \equiv \frac{1}{2i} \text{Tr} (F(x; \tau) T^b) . \quad (\text{B.77})$$

Avaliando o resultado em $\tau = 0$ temos que

$$F^b(x; \tau = 0) = \sum_{\mu=1}^d (U_\mu^b(x) - U_\mu^b(x - \hat{\mu})) . \quad (\text{B.78})$$

Para a definição do campo de calibre na rede dada por

$$\hat{A}_\mu(x) \equiv \frac{1}{2} [U_\mu(x) - U_\mu^\dagger(x)] \quad (\text{B.79})$$

e parametrização de matrizes $SU(2)$

$$A \equiv A_0 \mathbb{1} + i \vec{A} \cdot \vec{\sigma} , \quad (\text{B.80})$$

temos, a partir de (2.74) e (B.78), que para $SU(2)$

$$\mathcal{E}'_U(0) = \frac{a^d}{dV} \sum_x [\gamma(x)]^b \left[(\nabla \cdot \hat{\mathbf{A}})(x) \right]^b, \quad (\text{B.81})$$

onde $b = 1, 2, 3$ é o índice de cor e

$$\left[(\nabla \cdot \hat{\mathbf{A}})(x) \right]^b = \sum_{\mu=1}^d (\hat{\mathbf{A}}_\mu^b(x) - \hat{\mathbf{A}}_\mu^b(x - \hat{\mu})) = F^b(x; \tau = 0) \quad (\text{B.82})$$

é a versão discretizada da divergência do campo de calibre. Se $\{U_\mu(x)\}$ é um ponto estacionário de $\mathcal{E}_U[g(\tau)]$ em $\tau = 0$ (*i.e.* $g(\tau, x) = \mathbb{1}, \forall x$) então temos $\mathcal{E}'(0) = 0$ para todos $\{\gamma^b(x)\}$. Isto implica

$$\left[(\nabla \cdot \hat{\mathbf{A}})(x) \right]^b = 0 \quad \forall x, b, \quad (\text{B.83})$$

que é a versão discretizada do calibre de Landau.

B.6 Da ação de Wilson aos grampos

O termo dependente de elos na ação de Wilson (1.48) é dado por

$$S[U_\mu(x)] = -\frac{\beta}{2N} \sum_x \sum_{1 \leq \mu < \nu \leq d} O_{\mu\nu}(x), \quad (\text{B.84})$$

onde

$$O_{\mu\nu}(x) \equiv \text{Tr}(P_{\mu\nu}(x) + P_{\mu\nu}^\dagger(x)). \quad (\text{B.85})$$

Estamos interessados apenas nos termos de (B.84) que dependam de um elo específico $U_\theta(y)$. Para tanto a reescrevemos como

$$S[U_\mu(x)] = \tilde{S}[U_\theta(y)] + \check{S}[\{U_\mu(x)\}, U_\theta(y) \notin \{U_\mu(x)\}], \quad (\text{B.86})$$

onde

$$\begin{aligned} \tilde{S}[U_\theta(y)] &= -\frac{\beta}{4N} \left[\sum_\nu \left(\text{Tr}(P_{\theta\nu}(y) + h.c.) + \text{Tr}(P_{\theta\nu}(y - e_\nu) + h.c.) \right) \right. \\ &\quad \left. + \sum_\mu \left(\text{Tr}(P_{\mu\theta}(y) + h.c.) + \text{Tr}(P_{\mu\theta}(y - e_\mu) + h.c.) \right) \right] \\ &= -\frac{\beta}{2N} \sum_\nu \left(\text{Tr}(P_{\theta\nu}(y) + P_{\theta\nu}^\dagger(y) + P_{\theta\nu}(y - e_\nu) + P_{\theta\nu}^\dagger(y - e_\nu)) \right), \quad (\text{B.87}) \end{aligned}$$

que reescrevemos como

$$\tilde{S}[U_\theta(y)] = -\frac{\beta}{N} \text{Re}[\text{Tr}(U_\theta(y) s_\theta(y))], \quad (\text{B.88})$$

onde

$$s_\theta(y) = \sum_{\mu \neq \theta} \left[\Sigma_{\theta\mu}^{(+)}(y) + \Sigma_{\theta\mu}^{(-)}(y) \right] \quad (\text{B.89})$$

e

$$\Sigma_{\theta\mu}^{(+)}(y) = U_\mu(y + \hat{\theta})U_\theta^\dagger(y + \hat{\mu})U_\mu^\dagger(y), \quad (\text{B.90})$$

$$\Sigma_{\theta\mu}^{(-)}(y) = U_\nu^\dagger(y - \hat{\mu} + \hat{\theta})U_\theta^\dagger(y - \hat{\mu})U_\mu(y - \hat{\mu}). \quad (\text{B.91})$$

B.7 Projeção de matrizes em $SU(2)$

Parametrizamos as matrizes $SU(2)$ por

$$U \equiv U_0 \mathbb{1} + i \vec{U} \cdot \vec{\sigma}, \quad (\text{B.92})$$

onde

$$u_0^2 + |\vec{u}|^2 = 1. \quad (\text{B.93})$$

Seja a matriz complexa C :

$$C \equiv c_0 \mathbb{1} + i \vec{c} \cdot \vec{\sigma}; \quad (\text{B.94})$$

usando a identidade

$$(\vec{a} \cdot \vec{\sigma})(\vec{b} \cdot \vec{\sigma}) = \vec{a} \cdot \vec{b} \mathbb{1} + i(\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{\sigma} \quad (\text{B.95})$$

chegamos a

$$CC^\dagger = (c_0^2 + |\vec{c}|^2) \mathbb{1}. \quad (\text{B.96})$$

Define-se a *projeção da matriz C* em $SU(2)$ por

$$\tilde{C} = \text{Pr}(C) \equiv \frac{C}{\sqrt{c_0^2 + |\vec{c}|^2}}, \quad (\text{B.97})$$

já que

$$\tilde{C}\tilde{C}^\dagger = 1 \rightarrow \tilde{C} \in SU(2); \quad (\text{B.98})$$

tomando o determinante dos dois lados da equação (B.97)

$$\det \tilde{C} \equiv \frac{\det C}{c_0^2 + |\vec{c}|^2},$$

$$\det C = c_0^2 + |\vec{c}|^2. \quad (\text{B.99})$$

Chegamos então à forma final para a projeção da matriz C em $SU(2)$:

$$\tilde{C} = \text{Pr}(C) = \frac{C}{\sqrt{\det C}}. \quad (\text{B.100})$$

B.8 Algoritmo de Kennedy-Pendleton

Queremos obter uma distribuição de probabilidade da forma

$$P(u)du \propto (1 - u^2)^{1/2} e^{\alpha u} du, \quad u \in [-1, 1], \quad (\text{B.101})$$

usando o algoritmo desenvolvido em [180]. Fazemos uma mudança de variável

$$\delta = (1 - u)^{1/2}, \quad (\text{B.102})$$

para obter

$$P'(\delta)d\delta \propto \left(1 - \frac{\delta^2}{2}\right)^{1/2} \delta^2 e^{-\alpha\delta^2} d\delta, \quad \delta \in [0, \sqrt{2}]. \quad (\text{B.103})$$

Como no caso do algoritmo de Creutz, a contribuição do termo $(1 - \frac{\delta^2}{2})^{1/2}$ será considerada via aceita-rejeita. Assim, nos preocuparemos em achar a transformada inversa da distribuição

$$P''(\delta)d\delta \propto \delta^2 e^{-\alpha\delta^2} d\delta, \quad \delta \in [0, \infty); \quad (\text{B.104})$$

isto é feito via distribuições gaussianas.

Seja X uma variável aleatória no intervalo unitário; pretendemos gerar uma outra distribuição de probabilidades a partir da uniforme usando

$$P_\xi(\xi) = \int_0^1 dX \delta(\xi - \xi(X)), \quad \xi \in [0, \infty) \quad (\text{B.105})$$

onde

$$\xi = \sqrt{\frac{-\ln(X)}{\alpha}}; \quad (\text{B.106})$$

temos então

$$P_\xi(\xi) = \int_0^1 dX \delta(X - e^{-\alpha\xi^2}) \alpha X \sqrt{\frac{-\ln(X)}{\alpha}} \quad (\text{B.107})$$

$$= 2\xi\alpha e^{-\alpha\xi^2}. \quad (\text{B.108})$$

A partir de $P_\xi(\xi)$ vamos gerar a distribuição $P'(\delta)$.

Gera-se um valor X' e avalia-se

$$\rho = \chi \cos(2\pi X'), \quad (\text{B.109})$$

tal que χ esteja distribuído como em (B.108). A distribuição de ρ será então

$$\begin{aligned} P_\rho(\rho) &= \int_0^\infty d\chi \int_0^1 dX' P_\xi(\chi) \delta(\rho - \chi \cos(2\pi X')), \\ &= \int_0^\infty d\chi \int_0^{2\pi} d\theta \frac{\chi\alpha}{\pi} e^{-\alpha\chi^2} \delta(\rho - \chi \cos(\theta)), \end{aligned} \quad (\text{B.110})$$

que pode ser escrita em termos de coordenadas cartesianas como

$$\begin{aligned} P_\rho(\rho) &= \int_{-\infty}^{\infty} da \int_{-\infty}^{\infty} db \frac{\alpha}{\pi} e^{-\alpha(a^2+b^2)} \delta(\rho - a) , \\ &= \frac{\alpha e^{-\alpha\rho^2}}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} db e^{-\alpha b^2} , \end{aligned} \quad (\text{B.111})$$

o que leva a distribuição gaussiana

$$P_\rho(\rho) = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} e^{-\alpha\rho^2}, \quad -\infty < \rho < \infty ; \quad (\text{B.112})$$

no procedimento acima está contido o *método de Box-Mueller*.

Combinando a distribuição gaussiana (B.112) com a distribuição (B.108) poderemos obter a distribuição (B.104) usando

$$\begin{aligned} P''(\delta) &= \int_0^\infty d\xi \int_{-\infty}^\infty d\rho P_\xi(\xi) P_\rho(\rho) \delta(\delta - \sqrt{\xi^2 + \rho^2}) , \\ &= \int_0^\infty d\xi \int_{-\infty}^\infty d\rho 2\alpha \chi \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} e^{-\alpha(\xi^2 + \rho^2)} \delta(\delta - \sqrt{\xi^2 + \rho^2}) . \end{aligned} \quad (\text{B.113})$$

Em coordenadas polares a expressão acima fica

$$\begin{aligned} P''(\delta) &= \int_0^\infty dr \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\phi 2\alpha r^2 \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \cos(\phi) e^{-\alpha r^2} \delta(\delta - r) , \\ &= 4\alpha \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \delta^2 e^{-\alpha\delta^2} \end{aligned} \quad (\text{B.114})$$

que é a distribuição (B.104) procurada.

B.9 Transformada parcial de Fourier para formas analíticas conhecidas

Nesta seção calculamos a transformada parcial de Fourier para algumas formas analíticas mais conhecidas. Para uma forma escalar geral $D(q^2)$ definimos

$$C(t, \vec{q}) \equiv \frac{1}{2\pi} \int dq_0 D(q_0, \vec{q}) e^{iq_0 t} . \quad (\text{B.115})$$

Estamos particularmente interessados no comportamento de $C(t, \vec{q})$ a momentum nulo:

$$C(t) \equiv C(t, \vec{q} = 0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dq_0 D(q_0, \vec{0}) e^{iq_0 t} ; \quad (\text{B.116})$$

Nos referiremos a $C(t)$ como função de Schwinger.

i) Propagador livre massivo

$$D_{\text{mass}}(q^2) = \frac{1}{q^2 + m^2} \quad (\text{B.117})$$

De (B.116) obtemos

$$C_{\text{mass}}(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dq_0 \frac{e^{iq_0 t}}{q_0^2 + m^2} = \frac{e^{-mt}}{2m}, \quad (\text{B.118})$$

onde consideramos o pólo $q_0 = +im$, fechamos o contorno por cima e usamos teorema dos resíduos.

ii) Propagador quártico

$$D_{\text{quartico}}(q^2) = \frac{s}{q^4 + m^4} \quad (\text{B.119})$$

De (B.116) obtemos

$$C_{\text{quartico}}(t) = \frac{s}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dq_0 \frac{e^{iq_0 t}}{q_0^4 + m^4}; \quad (\text{B.120})$$

considerando os pólos $m/\sqrt{2}(i \pm 1)$ fechamos o contorno por cima e usamos o teorema dos resíduos para obter

$$C_{\text{quartico}}(t) = \frac{s e^{-mt/\sqrt{2}}}{m^3 2^{3/2}} \left[\cos\left(\frac{m}{\sqrt{2}} t\right) + \sin\left(\frac{m}{\sqrt{2}} t\right) \right] \quad (\text{B.121})$$

$$= \frac{s e^{-mt/\sqrt{2}}}{2m^3} \cos\left(\frac{m}{\sqrt{2}} t - \frac{\pi}{4}\right). \quad (\text{B.122})$$

Para $t > 3\sqrt{2}\pi/4m$ temos que $C_{\text{quartico}}(t)$ torna-se negativa.

iii) Propagador de Gribov

$$D_{\text{Gribov}}(q^2) = \frac{q^2}{q^4 + m^4} \quad (\text{B.123})$$

Temos

$$C_{\text{Gribov}}(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dq_0 \frac{q_0^2 e^{iq_0 t}}{q_0^4 + m^4}. \quad (\text{B.124})$$

Nota-se, a partir de (B.122), que

$$C_{\text{Gribov}}(t) = -\frac{1}{s} \frac{d^2 C_{\text{quartico}}(t)}{dt^2}. \quad (\text{B.125})$$

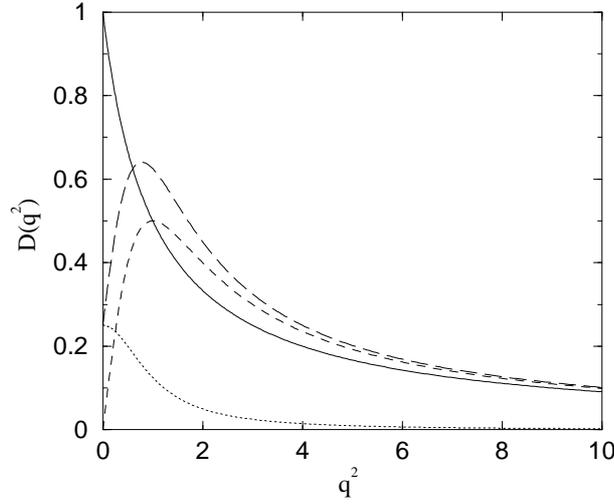


Fig. B.1: Formas conhecidas para o propagador do glúon $D(q^2)$: massivo livre (linha sólida), quártico (linha pontilhada), Gribov (linha tracejada) e Gribov não-nulo (linha de traços longos). (Fixamos $m = 1$ e $s = 0.5$.)

Assim, chegamos a

$$C_{\text{Gribov}}(t) = \frac{1}{2\sqrt{2}m} e^{-mt/\sqrt{2}} \left(\cos(mt/\sqrt{2}) - \sin(mt/\sqrt{2}) \right), \quad (\text{B.126})$$

que claramente não é positiva definida. A expressão acima ainda pode ser reescrita como

$$C_{\text{Gribov}}(t) = \frac{1}{2m} e^{-mt/\sqrt{2}} \cos\left(mt/\sqrt{2} + \frac{\pi}{4}\right). \quad (\text{B.127})$$

Nos intervalos

$$\frac{\sqrt{2}\pi}{4m} + 2\pi n < t < \frac{\sqrt{2}\pi}{4m} + 2\pi \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (\text{B.128})$$

com $n = 0, 1, \dots$, $C_{\text{Gribov}}(t)$ é negativa.

iv) Propagador de Gribov não-nulo no infravermelho

$$D_{\text{n.n.}}(q^2) = \frac{zq^2 + s}{q^4 + m^4} \quad (\text{B.129})$$

De (B.116), (B.122) e (B.127) temos

$$C_{\text{n.n.}}(t) = C_{\text{Gribov}}(t) + C_{\text{quártico}}(t), \quad (\text{B.130})$$

$$= z \frac{\sqrt{1+u^2}}{(2m)} e^{-mt/\sqrt{2}} \cos\left(mt/\sqrt{2} + \delta\right), \quad (\text{B.131})$$

onde

$$\delta = \arccos\left(\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1+u}{\sqrt{1+u^2}}\right), \quad (\text{B.132})$$

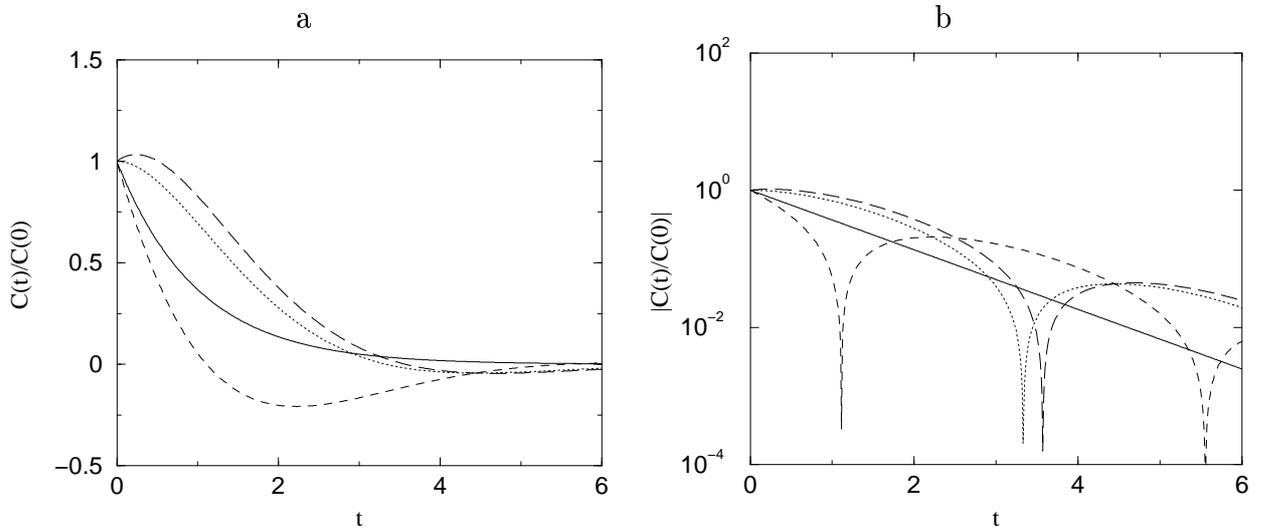


Fig. B.2: *a)* Funções $C(t)$ para formas conhecidas do propagador do glúon: massivo livre (linha sólida), quártico (linha pontilhada), Gribov (linha tracejada) e Gribov não-nulo (linha de traços longos). *b)* Mesmo que em *a)*, mas com escala logarítmica no eixo das ordenadas. (Fixamos $m = 1$ e $s = 0.5$.)

com $u \equiv s/zm^2$. Também troca de sinal periodicamente.

Na figura B.1 graficamos estas quatro formas funcionais para o propagador do glúon no espaço de momenta. A função $C(t)$ normalizada é apresentada na figura B.2; as cúspides no gráfico logarítmico acusam a troca de sinal em $C(t)$.

B.10 Transformada discreta de Fourier

Vamos relembrar algumas fórmulas interessantes da análise de Fourier para os casos de *i)* uma rede de pontos contínua e infinita, *ii)* uma rede de pontos discreta e infinita, *iii)* uma rede de pontos contínua e finita, e, finalmente, *iv)* uma rede de pontos discreta e finita.

i) Rede de pontos contínua e infinita

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{ipx} \tilde{f}(p), \quad x \in (-\infty, +\infty) \quad (\text{B.133})$$

$$\tilde{f}(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ipx} f(x), \quad p \in (-\infty, +\infty) \quad (\text{B.134})$$

ii) Rede de pontos discreta e infinita

$$f(x_n) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{+\pi/a} dp e^{ipx} \tilde{f}(p), \quad x_n = na \quad (\text{B.135})$$

$$\tilde{f}(p) = \lim_{N \rightarrow \infty} a \sum_{n=0}^{N-1} e^{-ipx_n} f(x_n), \quad p \in [-\pi/a, +\pi/a] \quad (\text{B.136})$$

iii) Rede de pontos contínua e finita

$$f(x) = \lim_{N \rightarrow \infty, a \rightarrow 0} \frac{1}{L} \sum_{n=0}^{N-1} \tilde{f}(p_n) e^{ip_n x}, \quad x \in [-L, L], \quad L = Na \quad (\text{B.137})$$

$$\tilde{f}(p_n) = \int_{-L}^{+L} dx e^{-ip_n x} f(x), \quad p_n = \frac{2\pi n}{L} \quad (\text{B.138})$$

iv) Rede de pontos discreta e finita

$$f(x_n) = \frac{1}{L} \sum_{n=0}^{N-1} \tilde{f}(p_n) e^{ip_n x}, \quad x_n = n a, \quad L = Na \quad (\text{B.139})$$

$$\tilde{f}(p_n) = a \sum_{n=0}^{N-1} e^{-ip_n x_n} f(x_n), \quad p_n = \frac{2\pi n}{L} \quad (\text{B.140})$$

Em (B.139) e (B.140) estão as expressões a serem generalizadas para dimensões maiores que um:

$$f(\{x_\mu\}) = \frac{1}{L^d} \sum_{n_\mu=0}^{N-1} \tilde{f}(\{p_\mu\}) e^{ip \cdot x}, \quad x_\mu = n_\mu a, \quad L = Na \quad (\text{B.141})$$

$$\tilde{f}(\{p_\mu\}) = a^d \sum_{n_\mu=0}^{N-1} e^{-ip \cdot x} f(\{x_\mu\}), \quad p_\mu = \frac{2\pi n_\mu}{L} \quad (\text{B.142})$$

A partir delas definimos a *transformada parcial de Fourier* como

$$C(t, \{p_i\}) = \frac{1}{L} \sum_{n_0=0}^{N-1} e^{ip_0 t} D(\{p_\mu\}), \quad p_0 = \frac{2\pi n_0}{L}. \quad (\text{B.143})$$

Da expressão (B.57)

$$\mathbf{D}_{\mu\nu}^{bc}(x) = \frac{1}{V} \delta^{bc} \left[\mathbf{D}(0) \delta_{\mu\nu} + \sum_{k \neq 0} e^{ik \cdot x} \mathbf{D}(k) \mathbf{P}_{\mu\nu} \right], \quad (\text{B.144})$$

definimos a *transformada parcial de Fourier do propagador do glúon na rede* como

$$\mathbf{C}_{\mu\nu}^{bc}(t, \vec{p}) = \sum_{\vec{x}} e^{-i\vec{p} \cdot \vec{x}} \mathbf{D}_{\mu\nu}^{bc}(x), \quad \vec{p}^j = \frac{2\pi \vec{k}^j}{L}. \quad (\text{B.145})$$

Usando $\sum_x e^{i\vec{p} \cdot \vec{x}} = L^{d-1} \delta^{(d-1)}(\vec{p})$ reduzimos a expressão acima a

$$\mathbf{C}_{\mu\nu}^{bc}(t, \vec{p}) = \frac{\delta^{bc}}{L} \left[\mathbf{D}(0) \delta_{\mu\nu} + \sum_{p \neq 0} e^{ipx} \mathbf{D}(p) \mathbf{P}_{\mu\nu} \right]. \quad (\text{B.146})$$

Interessa-nos obter o comportamento desta função para momentum nulo, pois está relacionada às singularidades do plano complexo:

$$C_{\mu\nu}^{bc}(t, \vec{0}) = \frac{\delta^{bc}}{L} \left[D(0)\delta_{\mu\nu} + \sum_{n_0 \neq 0} e^{i2\pi n_0 t/L} D(p_0, \vec{0}) P_{\mu\nu}(p_0, \vec{0}) \right]. \quad (\text{B.147})$$

Algumas propriedades de

$$P_{\mu\nu}(p_0, \vec{0}) = \delta_{\mu\nu} - \frac{\sin(\pi n_\mu/N) \sin(\pi n_\nu/N)}{\sin^2(\pi n_0/N)} \quad (\text{B.148})$$

são

$$P_{00}(p_0, \vec{0}) = 0, \quad (\text{B.149})$$

$$P_{0i}(p_0, \vec{0}) = 0, \quad (\text{B.150})$$

$$P_{ii}(p_0, \vec{0}) = 1. \quad (\text{B.151})$$

Temos assim

$$C_{00}^{bc}(t, \vec{0}) = \frac{\delta^{bc}}{L} D(0) \quad (\text{B.152})$$

e

$$C_{ii}^{bc}(t, \vec{0}) = \frac{1}{L} \sum_{n_0=0}^{N-1} e^{ip_0 t} D(p_0, \vec{0}), \quad p_0 = \frac{2\pi n_0}{L}; \quad (\text{B.153})$$

as componentes não diagonais são nulas. A primeira equação não nos interessa, pois não há evolução temporal; nos atemos a (B.153).

Simplificamos a notação extirpando os índices de cor e de Lorentz, pois são diagonais. Definimos

$$C(t) \equiv \frac{1}{L} \sum_{n_0=0}^{N-1} e^{ip_0 t} D(p_0), \quad p_0 = \frac{2\pi n_0}{L}. \quad (\text{B.154})$$

É o decaimento desta função que queremos investigar.

Apêndice C

Simulação serial com O.H.Q.

C.1 Simulação serial com oscilador harmônico quântico

Para ilustrar em detalhes uma simulação utilizaremos o oscilador harmônico quântico (O.H.Q.) o qual, sendo exatamente solúvel, presta-se bem para comparações de precisão¹. Trabalhamos na métrica euclidiana.

Nosso objetivo é calcular o propagador $G(t)$ para que possamos, através de seu decaimento exponencial, inferir o valor da sua primeira excitação ΔE . No caso do O.H.Q. sabemos que esta vale $\Delta E = \hbar\omega$, ou, nas unidades utilizadas para facilitar a notação ($\hbar = m = \omega = 1$), $\Delta E = 1$.

C.1.1 Teoria

O propagador é definido em termo, de integrais funcionais como

$$G(t) \equiv \frac{\int \mathcal{D}x(t)x(t_2)x(t_1)e^{-S[x]}}{\int \mathcal{D}x(t)e^{-S[x]}}, \quad (\text{C.1})$$

e em termos de operadores e vetores de estado como

$$G(t) \equiv \frac{\int dx(x(t_f, t_0)|\hat{x}(t_2)\hat{x}(t_1)|x(t_i, t_0))}{(x(t_f, t_0)|x(t_i, t_0))}, \quad (\text{C.2})$$

onde $t \equiv t_2 - t_1$, $t_f > t_2 > t_1 > t_i$ e t_0 é um tempo de referência. A primeira expressão é a mais propícia para simular, mas manipulações da segunda é que nos permitirão interpretar fisicamente o decaimento do propagador.

Definimos um valor esperado

$$F(x, t) \equiv (x(t_f, t_0)|\hat{x}(t_2)\hat{x}(t_1)|x(t_i, t_0)), \quad (\text{C.3})$$

onde $|.)$ são vetores na representação de Heisenberg. Passando à representação de Schrödinger obtemos

$$\begin{aligned} F(x, t) &\equiv \langle x|e^{-\hat{H}(t_f-t_0)}e^{\hat{H}(t_2-t_0)}\hat{x}e^{-\hat{H}(t_2-t_0)}e^{\hat{H}(t_1-t_0)}\hat{x}e^{-\hat{H}(t_1-t_0)}e^{\hat{H}(t_i-t_0)}|x\rangle \\ &= \langle x|e^{-\hat{H}(t_f-t_2)}\hat{x}e^{-\hat{H}(t_2-t_1)}\hat{x}e^{-\hat{H}(t_1-t_i)}|x\rangle. \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

¹ Este apêndice segue de perto as indicações de um problema proposto em [212].

Introduzindo relações de clausura na identidade acima ficamos com

$$\begin{aligned}
 F(x, t) &= \sum_{m,n,l} \langle x|E_n\rangle \langle E_n|e^{-E_n(t_f-t_2)}\hat{x}|E_m\rangle \langle E_m|e^{-E_m(t_2-t_1)}\hat{x}e^{-E_l(t_1-t_i)}|E_l\rangle \langle E_l|x\rangle \\
 &= \sum_{m,n,l} e^{-E_n(t_f-t_2)} e^{-E_l(t_1-t_i)} e^{-E_m(t_2-t_1)} \langle E_n|\hat{x}|E_m\rangle \langle E_m|\hat{x}|E_l\rangle \langle E_l|x\rangle \langle x|E_n\rangle \quad (C.5)
 \end{aligned}$$

(C.6)

Considerando que a bem conhecida identidade do O.H.Q. [213]

$$\langle E_n|\hat{x}|E_m\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} + \sqrt{n}\delta_{m,n-1} \right] \quad (C.7)$$

não possui dependência em x , podemos integrar $F(x, t)$ sobre todo o domínio, utilizar a relação de clausura para os auto-vetores de posição e obter

$$\tilde{F}(t) = \int dx F(x, t) = \sum_{n,m} e^{-E_n T} |\langle E_n|\hat{x}|E_m\rangle|^2 e^{-(E_m-E_n)t}, \quad (C.8)$$

onde definimos

$$T \equiv t_f - t_i, \quad (C.9)$$

$$t \equiv t_2 - t_1. \quad (C.10)$$

Usando (C.7) obtemos

$$\tilde{F}(t) = \frac{1}{2} \sum_n e^{-E_n T} \left[(n+1)e^{-(E_{n+1}-E_n)t} + ne^{-(E_{n-1}-E_n)t} \right]. \quad (C.11)$$

Em nossas unidades os autovalores de energia ficam

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (C.12)$$

$$E_{n+1} - E_n = 1, \quad (C.13)$$

$$E_{n-1} - E_n = -1 \quad (C.14)$$

e podemos reescrever (C.11) como

$$\tilde{F}(t) = \frac{1}{2} \sum_n e^{-(n+1/2)T} [(n+1)e^{-t} + ne^{+t}]. \quad (C.15)$$

Fazendo manipulações similares as de cima é fácil mostrar que

$$(x(t_f, t_0)|x(t_i, t_0)) = \sum_n e^{-(n+1/2)T}. \quad (C.16)$$

De (C.2) temos então que

$$G(t) = \frac{\sum_n e^{-nT} [(n+1)e^{-t} + ne^{+t}]}{2 \sum_n e^{-E_n T}}, \quad (C.17)$$

que pode ser ainda mais simplificado lembrando da identidade

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-nt} = \sum_{n=0}^{\infty} (e^{-t})^n = \frac{1}{1 - e^{-t}} ; \quad (\text{C.18})$$

obtemos

$$G(t) = \frac{1}{2} e^{-t} \left[\frac{1 + e^{-(T-2t)}}{1 - e^{-T}} \right] . \quad (\text{C.19})$$

Com $T \gg 1$ o comportamento de $G(t)$ é de decaimento exponencial para $t \ll T/2$. Algumas propriedades do propagador são:

$$G(0) = \frac{1}{2} ; \quad (\text{C.20})$$

$$\left. \frac{dG(t)}{dt} \right|_{t=T/2} = 0 . \quad (\text{C.21})$$

Para obtermos diretamente as diferenças dos autovalores de energia usamos a seguinte grandeza

$$\Delta E(t) \equiv \frac{1}{a} \log[G(t)/G(t+a)] \quad (\text{C.22})$$

a qual, usando (C.19) reduz-se a

$$\Delta E(t) = 1 + \frac{1}{a} \log \left[\frac{1 + e^{-(T-2t)}}{1 + e^{-(T-2(t+a))}} \right] . \quad (\text{C.23})$$

Novamente, para $T \gg 1$ e $t \ll T/2$ teremos $\Delta E \rightarrow 1$, como esperado. As expressões (C.19) e (C.23) estão graficadas nas figuras (C.3.a) e (C.4.b), onde $T = 10$.

Tendo as expressões exatas para $G(t)$ e $\Delta E(t)$ nos voltamos ao problema de obtê-las numericamente. Para utilizar (C.1) no computador precisamos que ela seja finita. Explícitamente temos as seguintes definições

$$(x(t_f, t_0) | \hat{x}(t_2) \hat{x}(t_1) | x(t_i, t_0)) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{2\pi a} \right)^{N/2} \int \left[\prod_{l=0}^{N-1} dx^{(l)} \right] x(t_1) x(t_2) e^{-S_E[x^{(l)}]} \quad (\text{C.24})$$

$$(x(t_f, t_0) | x(t_i, t_0)) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{2\pi a} \right)^{N/2} \int \left[\prod_{l=0}^{N-1} dx^{(l)} \right] e^{-S_E[x^{(l)}]} , \quad (\text{C.25})$$

onde

$$S_E[x^{(l)}] = a \sum_{l=0}^{N-1} \left[\frac{\dot{x}^{(l)2}}{2} + \frac{x^{(l)2}}{2} \right] , \quad (\text{C.26})$$

$$\dot{x}^{(l)} = (x^{(l+1)} - x^{(l)})/a , \quad (\text{C.27})$$

$$Na = t_f - t_i = T . \quad (\text{C.28})$$

Condições periódicas de contorno nos dão que

$$x(t_i) = x^{(0)} = x(t_f) = x^{(N)} \equiv x . \quad (\text{C.29})$$

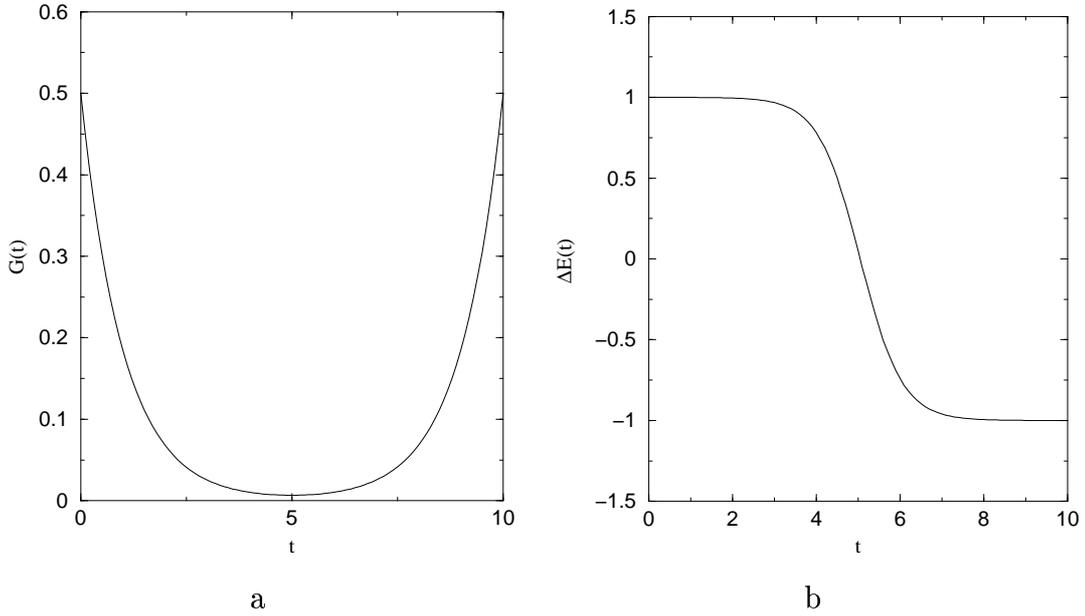


Fig. C.1: Propagador e primeira excitação.

Para que tenhamos uma expressão finita precisamos de um N finito. Por exemplo, para $N = 4$ teríamos para $G(t = 2a)$

$$G(t_2 = 3a, t_1 = a) = \frac{P_1}{P_2}, \quad (\text{C.30})$$

com

$$P_1 = \left(\frac{1}{2\pi a} \right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx dx^{(1)} dx^{(2)} dx^{(3)} x^{(1)} x^{(3)} e^{-S_E}, \quad (\text{C.31})$$

$$P_2 = \left(\frac{1}{2\pi a} \right)^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx dx^{(1)} dx^{(2)} dx^{(3)} e^{-S_E}, \quad (\text{C.32})$$

$$S_E = \frac{1}{2a^2} [(x^{(1)} - x)^2 + (x^{(2)} - x^{(1)})^2 + (x^{(3)} - x^{(2)})^2 + (x - x^{(3)})^2] + \frac{1}{2} [x^2 + x^{(1)2} + x^{(2)2} + x^{(3)2}]. \quad (\text{C.33})$$

Neste caso temos $T = 4a$ e $t = 2a$. Para investigarmos o decaimento exponencial de $G(t)$ precisamos de uma rede maior (T maior) na qual $t \ll T/2$ tenha validade.

C.1.2 Simulação

Como detalhado no capítulo 3, integrais multidimensionais como (C.30) podem ser avaliadas aproximadamente através do método de Monte Carlo (notar que S_E , eq. (C.26), é sempre positiva) o qual demanda algum processo de atualização. Neste exemplo de simulação adotamos os passos do tradicional algoritmo de Metropolis. Varremos todos os sítios da rede (cada sítio corresponde a um $x^{(l)}$) e em cada um se realizam os seguintes passos:

1. Sorteia-se um número $\xi \in (0, 1]$ para gerar um valor teste para o sítio l através de

$$x_{teste}^{(l)} = x^{(l)} + (2\epsilon\xi - \epsilon) ; \quad (\text{C.34})$$

(ϵ será a maior modificação possível do sítio: se for muito grande a modificação de $x^{(l)}$ será em geral grande e provavelmente não será aceita; se ϵ for muito pequeno a aceitação será maior, mas varrerá pouco o domínio de $x^{(l)}$. Seu valor deve ser tal que 50 – 60% das atualizações sejam aceitas.)

2. Comparam-se as ações do velho valor, $S \equiv S[x^{(l)}]$, e do valor teste, $S_{teste} \equiv S[x_{teste}^{(l)}]$.

- (a) Se

$$e^{-\Delta S} \equiv \frac{e^{-S_{teste}}}{e^{-S}} \geq 1 \quad (\text{C.35})$$

então aceita-se a atualização ($x^{(l)} = x_{teste}^{(l)}$). Fim da atualização do sítio l .

- (b) Do contrário, sorteia-se um segundo número $\chi \in (0, 1]$:

- i. Se $\chi < e^{-\Delta S}$ aceita-se a atualização. Fim da atualização do sítio l .

- ii. Do contrário, mantém-se o valor de $x^{(l)}$. Fim da atualização do sítio l .

É interessante obter explicitamente ΔS ; pra isso precisamos apenas saber os termos de S que dependem do sítio que queremos atualizar. De (C.26) temos

$$S = a \sum_{l=0}^{N-1} S_l \quad (\text{C.36})$$

com

$$S_l = \frac{x^{(l+1)2} - 2x^{(l+1)}x^{(l)} + x^{(l)2}}{2a^2} + \frac{x^{(l)2}}{2} . \quad (\text{C.37})$$

Da expressão acima é claro que apenas S_l e S_{l-1} contêm termos que dependem de $x^{(l)}$

$$S_{l-1} + S_l = s^{(l)} + \text{termos que não dependem de } x^{(l)} , \quad (\text{C.38})$$

onde

$$s^{(l)} = \frac{x^{(l)2}}{2} - \frac{(x^{(l+1)} + x^{(l-1)} - x^{(l)})x^{(l)}}{a^2} . \quad (\text{C.39})$$

Assim sendo, temos que

$$\Delta S(x^{(l)}) = a (s'^{(l)} - s^{(l)}) . \quad (\text{C.40})$$

Começando com uma configuração arbitrária de $\{x^{(l)}\}$ procedemos à geração de uma nova configuração usando os passos enumerados acima. Surgem dois problemas.

Primeiro, a configuração inicial pode não estar distribuída de acordo com o peso de Maxwell-Boltzmann e^{-S} , não sendo portanto válida sua utilização para o cálculo das médias de Monte Carlo. Apenas após um determinado número de atualizações é que $\{x^{(l)}\}$ atende a esta exigência. Assim, deixamos que se processem N_{terma} atualizações antes de guardar uma configuração válida para medida; este processo é chamado de *termalização da rede*.

O segundo problema se refere ao fato de que uma nova configuração estará muito correlacionada a sua imediata predecessora, não sendo também compatível com as exigências para média de Monte Carlo. O que se faz é gerar N_{cor} atualizações e só guardar a última; esta estará, para N_{cor} grande o suficiente, bastante decorrelacionada da última configuração utilizada no cálculo da média de Monte Carlo.

No programa calculamos $G(t)$ e $\Delta E(t)$; os erros são analisados usando as técnicas de reamostragem simples (*binning*) e aleatória (*bootstrap*) para ilustrar a discussão desses tópicos apresentadas no capítulo 3. Utilizamos $N = 20$, $a = 0.5$, $\epsilon = 1.4$ e $N_{cor} = 20$. Graficamos os resultados da simulação de $G(t)$ e $\Delta E(t)$, com $N_{conf} = 2000$, na figuras (C.2.a) e (C.2.b). Os resultados mostram boa concordância com as expressões exatas. O programa está explicitado nas figuras C.3, C.4 e C.5.

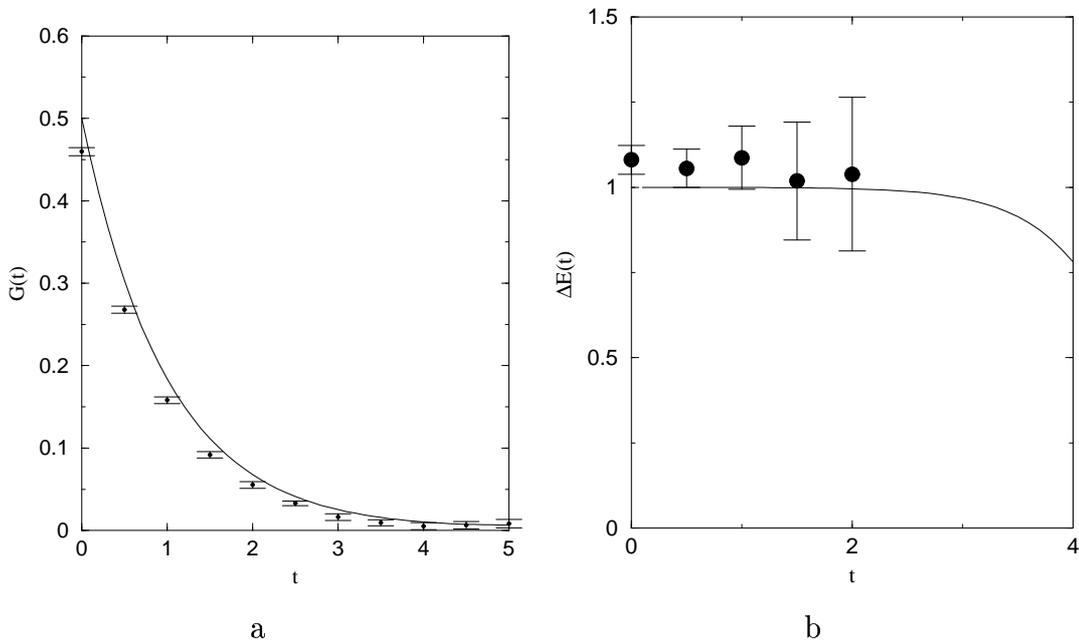


Fig. C.2: Propagador e primeira excitação comparados com resultados da simulação.

Programa serial para oscilador harmônico quântico

Fig. C.3: Simulação O.H.Q. (1).

```

*****
*
*          QUANTUM HARMONIC OSCILLATOR
*          MONTE CARLO SIMULATION CODE
*          by A. Taurines, 09/2003
5 *
*
*          based on proposed problem in
*          G. P. Lepage's "Lattice QCD for novices"
*
*
*          *****
*          This package is free software and you can use this under:
*          "the GNU General Public License" published by the FSF.
*          *****
10 *****
*
*          implicit none
*          integer n,ncor,ncf,nn,nalpha,idum,nbin,
15 #          ncf2,nbtcp,j,k
*          real a,eps,avg,g(1:2000,0:50),boot(1:2000,0:50)
*          real gauX(1:2000,0:50),bin(1:2000,0:50)
*          real del(1:2000,0:50),del2(1:2000,0:50)
20 *          real ratio,sig,savg,savg2,den
*          common /data/ n,a
*          common /data2/ idum,eps
*          common /data3/ ncf
*          external compute,uniform,actionj
25 *          n = 20                !# of time slices, n<50
*          ncor = 40              !# of decorrelation steps, \propto 1/a^2
*          ncf = 2000             !# of configurations, ncf<2000
*          nbin = 20              !bin spacing, must be a divisor of ncf
*          nbtcp = 100           !# of bootstrap copies
30 *          eps = 1.4            !maximum step for update
*          a = .5                 !lattice spacing
*          ncf2 = ncf/nbin

ccc obtain new SEED for ran2.f
35 *          open(21,file='SEED')
*          read(21,*) idum
*          rewind 21
*          idum = -abs(idum)

40 ccc Monte Carlo: gives back NCF evaluations of
ccc the propagator for each one of the N time slices
call MC(n,ncor,ncf,a,eps,g)

45 ccc Bootstrap and Binning Error Analysis
do nn=0,n-1 !each nn corresponds to a different time slice

ccc bin the data
do nalpha=1,ncf
50 *          call bin_rout(g,bin,nn,nbin,ncf)
*          enddo

ccc generates nbtcp bootstrap copies for G(t)
ccc from the ncf2 binned samples
55 *          do j=1,nbtcp
*          avg = 0.
*          call bootstrap(bin,boot,nn,ncf2)
*          do k=1,ncf2
*          avg = avg+ boot(k,nn)
60 *          enddo
*          gauX(j,nn) = avg/float(ncf2)
*          enddo

enddo

65 ccc Evaluations of \Delta E(t)
do j=1,nbtcp
do nn=0,n/2-6 ! safe range for non-negative ratio
ratio = (gauX(j,nn)/gauX(j,nn+1))
70 *          del(j,nn) = log(ratio)/a
*          enddo

```

```

enddo

ccc Mean values and errors of G(t)
75 *          savg=0.
*          savg2=0.
*          do nn=0,n-1
*          call dvt(gauX,nn,savg,savg2,sig,nbtcp)
*          write(24,*) nn*a,savg,sig !output in file fort.24
80 *          enddo

ccc Mean values and errors of \Delta E(t)
savg=0.
85 *          savg2=0.
*          do nn=0,n/2-6
*          call dvt(del,nn,savg,savg2,sig,nbtcp)
*          write(25,*) nn*a,savg,sig !output in file fort.25
90 *          enddo

ccc update SEED file for the next calculation
write(21,*) abs(idum)
close(21)
end

95 ccc END OF MAIN
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC

100 CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
ccc ROUTINE MC
ccc generates propagators g through Monte Carlo Method
105 ccc INPUT: n,ncor,ncf,a,eps
ccc OUTPUT: g(1:2000,0:50)
subroutine MC(n,ncor,ncf,a,eps,g)
implicit none
integer n,ncor,ncf,nalpha,nn
real x(0:50),a,eps,avg,g(1:2000,0:50),compute,y
integer j

110 ccc initial configuration
do j=0,n-1
x(j)=0.
enddo

ccc lattice thermalization
do j=1,5*ncor
120 *          call update(x)
*          enddo

ccc generates NCF configurations
do nalpha=1,ncf
125 ccc jump NCF updates
do j=1,ncor
call update(x)
enddo

130 ccc evaluates g
do nn=0,n-1
g(nalpha,nn)=compute(x,nn)
enddo

135 enddo
return
end
ccc END OF ROUTINE MC
140 CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC

```

Fig. C.4: Simulação O.H.Q. (2).

```

CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
CCC  ROUTINE UPDATE
145 ccc  update the n values of x
ccc  INPUT: x(*)
ccc  OUTPUT: x(*)
    subroutine update(x)
    implicit none
150   real x(*),old_x,old_sj,actionj,uniform,a,
#     eps,ds,eaux,ale
    integer n,j,idum,i
    common /data/ n,a
    common /data2/ idum,eps
155   external actionj,uniform
    i=0 !counter for # of accepted updates

ccc  sweep the lattice
    do j=0,n-1

160   ccc  evaluates present action
        old_x = x(j)
        old_sj = actionj(j,x)

165   ccc  trial value for x(j)
        x(j) = x(j) + uniform(-eps,eps)

ccc  evaluates \Delta S
        ds=actionj(j,x)-old_sj

170   ccc  Metropolis steps
        if(ds.gt.0.) then
            eaux=exp(-ds)
            ale = uniform(0.,1.)
175   if(eaux.lt.ale)then
                x(j)=old_x
                i = i+1
            endif
        endif
    enddo

180   ccc  n-i = # of updatings

        return
    end
185   CCC  END OF ROUTINE UPDATE
    CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC

190   CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
    CCC  FUNCTION ACTIONJ
ccc  evaluates change in action due to change in x(j)
ccc  INPUT: x(*),j
ccc  OUTPUT: actionj
195   function actionj(j,x)
    implicit none
    real x(*),actionj,a
    integer j,jp,jm,n
    common /data/ n,a
    jp = mod(j+1,n)
200   jm = mod(j-1,n)
    actionj = a*x(j)**2/2.+x(j)*(x(j)-x(jp)-x(jm))/a
    return
    end
205   CCC  END OF FUNCTION ACTIONJ
    CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC

CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
210  CCC  FUNCTION COMPUTE
ccc  evaluates propagator for the nn time slice
ccc  INPUT: x(*),nn
ccc  OUTPUT: compute

```

```

function compute(x,nn)
215  implicit none
    real compute,aux,a
    integer nn,j,k,n
    common /data/ n,a
    real x(*)

220  ccc  using periodicity properties of propagator
    e.g., g(5,3)=g(4,2)=g(3,1)=g(2,0) ...
    aux = 0.
    do j=0,n-1
225     k = mod(j+nn,n)
        aux = aux + x(j)*x(k)
    enddo
    compute = aux/float(n)
    return
230  end
    CCC  END OF FUNCTION COMPUTE
    CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC

CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
235  CCC  ROUTINE BIN_ROUT
ccc  bin the data
ccc  INPUT: g(1:2000,0:50),nn,nbin,ncf
ccc  OUTPUT: bin(1:2000,0:50)
    subroutine bin_rout(g,bin,nn,nbin,ncf)
240   implicit none
    integer ncf,nbin,nn,nalpha,j,i
    real g(1:2000,0:50),bin(1:2000,0:50)
    real aux
    i = 0
245   do nalpha=1,ncf,nbin
        i=i+1
        aux = 0.
        do j=1,nbin
            aux = aux + g(nalpha+j,nn)
250         enddo
        bin(i,nn) = aux/float(nbin)
    enddo
    return
    end
255   CCC  END OF FUNCTION BIN_ROUT
    CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC

CCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
260  CCC  ROUTINE BOOTSTRAP
ccc  generates bootstrap copies
ccc  INPUT: bin(1:2000,0:50)
ccc  OUTPUT: boot(1:2000,0:50)
    subroutine bootstrap(bin,boot,nn,ncf2)
265   implicit none
    integer nalpha,nbeta,nn,ncf2
    real bin(1:2000,0:50),boot(1:2000,0:50)
    real uniform
    do nalpha=1,ncf2
270     nbeta=int(uniform(1.,float(ncf2)))
        boot(nalpha,nn)=bin(nbeta,nn)
    enddo
    return
    end
275   CCC  END OF ROUTINE BOOTSTRAP
    CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC

280  CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
    CCC  ROUTINE DVT
ccc  routine for standard deviation evaluation
ccc  INPUT: del(1:2000,0:50),nn,ncf
ccc  OUTPUT: savg,sav2,sig

```

```

285  subroutine dvt(del,nn,savg,savg2,sig,ncf)
      implicit none
      integer nn,j,ncf
      real del(1:2000,0:50),sig,savg,savg2
      savg=0.
290  savg2=0.
      do j=1,ncf
         savg=savg+del(j,nn)
         savg2=savg2+del(j,nn)**2
      enddo
295  savg=savg/float(ncf)
      savg2=savg2/float(ncf)
      sig = (savg2-savg**2)
      sig = sqrt(sig)
      return
      end
300  CCC  END OF ROUTINE DVT
      CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC

305  CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
      CCC  FUNCTION UNIFORM
      ccc  returns uniform random value between e_min and e_max
      ccc  INPUT: e_min,e_max
310  ccc  OUTPUT: uniform
      function uniform(e_min,e_max)
      implicit none
      real uniform,ran2,e_min,e_max,eps,ale
      integer idum
315  common /data2/ idum,eps
      ale = ran2(idum)
      uniform = (e_max-e_min)*ale+e_min
      return
      end
320  CCC  END OF UNIFORM
      CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC

      ccc  Standard random number generator (Numerical Recipes)
325  include 'ran2.f'

```

Fig. C.5: Simulação O.H.Q. (3).

Referências

- [1] ITZYKSON, C.; ZUBER, J. *Quantum field theory*. New York: McGraw-Hill, 1980.
- [2] CHENG, T. P.; LI, L. F. *Gauge theory of elementary particle physics*. Oxford: Oxford University Press, 1984.
- [3] PESKIN, M. E.; SCHROEDER, D. V. *An introduction to quantum field theory*. Reading: Addison-Wesley, 1995.
- [4] KAKU, M. *Quantum field theory: a modern introduction*. New York: Oxford University Press, 1993.
- [5] WEINBERG, S. *The quantum theory of fields*. Cambridge: Cambridge University, 1996. v. 1 Foundations.
- [6] WEINBERG, S. *The quantum theory of fields*. Cambridge: Cambridge University, 1996. v. 2 Modern applications.
- [7] MUTA, T. *Foundations of quantum chromodynamics: an introduction to perturbative methods in gauge theories*. 2. ed. Singapore: World Scientific, 1998.
- [8] WILCZEK, F. Quantum field theory. *Rev. Mod. Phys.*, Melville, v. 71, n. 2, p. S85–S95, Mar. 1999.
- [9] MARCIANO, W.; PAGELS, H. Quantum chromodynamics: a review. *Phys. Rep.*, Amsterdam, v. 36, n. 3, p. 137-276, Feb. 1978.
- [10] SEIBERG, N.; WITTEN, E. Electric-magnetic duality, monopole condensation, and confinement in N=2 supersymmetric Yang-Mills theory. *Nucl. Phys. B*, Amsterdam, v. 426, n. 1, p. 19-52, Sept. 1994.
- [11] WITTEN, E. (2+1)-dimensional gravity as an exactly soluble system. *Nucl. Phys. B*, Amsterdam, v. 311, n. 1, p. 46-78, Dec. 1988.
- [12] SCHON, V.; THIES, M. 2D model field theories at finite temperature and density. Disponível em: <<http://arxiv.org/hep-th/0008175>>. Acesso em: 15 out. 2003.
- [13] SCHWINGER, J. Gauge invariance and mass. II. *Phys. Rev.*, New York, v. 128, n. 5, p. 2425–2429, Dec. 1962.
- [14] DYSON, F. J. The S matrix in quantum electrodynamics. *Phys. Rev.*, New York, v. 75, n. 11, p. 1736–1755, June 1949.

- [15] SCHWINGER, J. On the Green's functions of quantized fields. I. *Proc. Nat. Acad. Sci.*, Washington, v. 37, n. 7, p. 452–455, July 1951.
- [16] SCHWINGER, J. On the Green's functions of quantized fields. II. *Proc. Nat. Acad. Sci.*, Washington, v. 37, n. 7, p. 455–459, July 1951.
- [17] ROBERTS, C. D.; WILLIAMS, A. G. Dyson-Schwinger equations and their application to hadronic physics. *Prog. Part. Nucl. Phys.*, Oxford, v. 33, p. 477–575, 1994.
- [18] ALKOFFER, R.; VON SMEKAL, L. The infrared behavior of QCD Green's functions: Confinement, dynamical symmetry breaking, and hadrons as relativistic bound states. *Phys. Rep.*, Amsterdam, v. 353, n. 5, p. 281–465, Nov. 2001.
- [19] WILSON, K. G. Confinement of quarks. *Phys. Rev. D*, New York, v. 10, n. 8, p. 2445–2459, Oct. 1974.
- [20] CREUTZ, M. *Quarks, gluons and lattices*. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1983.
- [21] ROTHE, H. J. *Lattice gauge theories: an introduction*. Singapore: World Scientific, 1992.
- [22] MONTVAY, I.; MUNSTER, G. *Quantum fields on a lattice*. Cambridge: Cambridge University Press, 1994.
- [23] OSTERWALDER, K.; SEILER, E. Gauge field theories on the lattice. *Ann. Phys.*, New York, v. 110, n. 2, p. 440–471, Feb. 1978.
- [24] OSTERWALDER, K.; SCHRADER, R. Axioms for euclidean Green's functions. *Commun. Math. Phys.*, Berlin, v. 31, n. 2, p. 83–112, May 1973.
- [25] OSTERWALDER, K.; SCHRADER, R. Axioms for euclidean Green's functions. II. *Commun. Math. Phys.*, Berlin, v. 42, n. 3, p. 281–305, June 1975.
- [26] GRIBOV, V. N. Quantization of non-abelian gauge theories. *Nucl. Phys. B*, Amsterdam, v. 139, n. 1/2, p. 1–19, June 1978.
- [27] ZWANZIGER, D. Fundamental modular region, Boltzmann factor and area law in lattice gauge theory. *Nucl. Phys. B*, Amsterdam, v. 412, n. 3, p. 657–730, Jan. 1994.
- [28] KUGO, T.; OJIMA, I. Local covariant operator formalism of non-abelian gauge theories and quark confinement problem. *Prog. Theor. Phys. Suppl.*, Kyoto, n. 66, p. 1–130, 1979.
- [29] KALLEN, G. On the definition of the renormalization constants in quantum electrodynamics. *Helv. Phys. Acta*, Basel, v. 25, n. 4, p. 417–434, Feb. 1952.

- [30] LEHMANN, H. On the properties of propagation functions and renormalization constants of quantized fields. *Nuovo Cimento*, Bologna, v. 11, n. 4, p. 342–357, apr. 1954.
- [31] MANDULA, J. E. The gluon propagator. *Phys. Rep.*, Amsterdam, v. 315, n. 1, p. 273–284, July 1999.
- [32] CUCCHIERI, A. Infrared behavior of the gluon propagator in lattice Landau gauge: the three-dimensional case. *Phys. Rev. D*, Melville, v. 60, n. 3, 034508 10p., Aug. 1999.
- [33] BONNET, F. D. R.; BOWMAN, P. O.; LEINWEBER, D. B.; WILLIAMS, A. G.; ZANOTTI, J. M. Infinite volume and continuum limits of the Landau-gauge gluon propagator. *Phys. Rev. D*, Melville, v. 64, n. 3, 034501 10p., Aug. 2001.
- [34] CUCCHIERI, A.; MENDES, T.; TAURINES, A. R. SU(2) Landau gluon propagator on a 140^3 lattice. *Phys. Rev. D*, Melville, v. 67, n. 9, 091502 5p., May 2003.
- [35] PACHECO, P. S. *Parallel programming with MPI*. San Francisco: Morgan Kaufmann, 1997.
- [36] HAMERSLEY, J. M.; HANDSCOMB, D. *Monte Carlo methods*. London: Methuen, 1975.
- [37] PRESS, W. H.; TEUKOLSKY, S. A.; VETTERLING, W. T.; FLANNERY, B. P. *Numerical recipes in Fortran 77*. 2. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1992.
- [38] HEERMANN, D. W.; BINDER, K. *Monte Carlo simulation in statistical physics: an introduction*. 3. ed. Berlin: Springer-Verlag, 1997.
- [39] NEWMAN, M. E. J.; BARKEMA, G. T. *Monte Carlo methods in statistical physics*. Oxford: Clarendon Press, 1999.
- [40] LANDAU, D.; BINDER, K. *A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics*. Cambridge: Cambridge University Press, 2000.
- [41] LEINWEBER, D. B.; SKULLERUD, J. I.; WILLIAMS, A. G.; PARRINELLO, C. Asymptotic scaling and infrared behavior of the gluon propagator. *Phys. Rev. D*, Melville, v. 60, n. 9, 094507 17p., Nov. 1999.
- [42] ZWANZIGER, D. Non-perturbative Landau gauge and infrared critical exponents in QCD. *Phys. Rev. D*, Melville, v. 65, n. 9, 094039 13p., May 2002.
- [43] ALKOFER, R.; DETMOLD, W.; FISCHER, C. S.; MARIS, P. Analytic properties of the Landau gauge gluon and quark propagators. *Phys. Rev. D*, Melville, v. 70, n. 1, 014014 26p., July 2002

- [44] CUCCHIERI, A.; MENDES, T.; TRAVIESO, G.; TAURINES, A. R. Parallel implementation of a lattice-gauge-theory code: studying quark confinement on pc clusters. In: SYMPOSIUM ON COMPUTER ARCHITECTURE AND HIGH PERFORMANCE COMPUTING, 15., 2003, São Paulo. *Proceedings of the ...*, New York: IEEE Computer Society, 2003. p. 100-106.
- [45] KOGUT, J. B. An introduction to lattice gauge theory and spin systems. *Rev. Mod. Phys.*, New York, v. 51, n. 4, p. 659–713, Oct. 1979.
- [46] BASKARAN, G.; ANDERSON, P. W. Gauge theory of high-temperature superconductors and strongly correlated Fermi systems. *Phys. Rev. B*, Woodbury, v. 37, n. 1, p. 580–583, Jan. 1988.
- [47] LUO, X.-Q.; CHEN, Q.-Z. Vacuum structure and chiral symmetry breaking in (2+1)- dimensional lattice gauge theories with fermions. *Phys. Rev. D*, Woodbury, v. 46, n. 2, p. 814–823, July 1992.
- [48] DAGOTTO, E.; FRADKIN, E.; MOREO, A. SU(2) gauge invariance and order parameters in strongly coupled electronic systems. *Phys. Rev. B*, Woodbury, v. 38, n. 4, p. 2926-2929, Aug. 1988.
- [49] HAYES, B. The world in a spin. *Am. Sci.*, Research Triangle Park, v. 88, n. 5, p. 384–388, Sept./Oct. 2000.
- [50] LENZ, W. Beitrag zu verständnis der magnetischen erscheinungen in festen körpern. *Phys. Zeits.*, Berlin, v. 21, p. 613–615, Nov. 1920.
- [51] ISING, E. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus. *Zeits. Physik*, Berlin, v. 31, n. 1/4, p. 253–258, 1925.
- [52] KOBE, S. Ernst Ising - physicist and teacher. Disponível em: <<http://arxiv.org/cond-mat/9605174>>. Acesso em: 16 out. 2003.
- [53] PEIERLS, R. On Ising's model of ferromagnetism. *Proc. Cambridge Philos. Soc.*, London, v. 32, n. 3, p. 477–481, July 1936.
- [54] ONSAGER, L. Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order disorder transition. *Phys. Rev.*, New York, v. 65, n. 3/4, p. 117–149, Feb. 1944.
- [55] STANLEY, H. E. *Introduction to phase transitions and critical phenomena*. Oxford: Oxford University Press, 1971.
- [56] BINNEY, J.; DOWRICK, N.; FISHER, A.; NEWMAN, M. *The theory of critical phenomena: an introduction to the renormalization group*. Oxford: Oxford University Press, 1992.
- [57] WILSON, K. G. Problems in physics with many scales of length. *Sci. Am.*, New York, v. 241, n. 2, p. 140–157, Aug. 1979.

- [58] JOSE, J. V.; KADANOFF, L. P.; KIRKPATRICK, S.; NELSON, D. R. Renormalization, vortices, and symmetry breaking perturbations on the two-dimensional planar model. *Phys. Rev. B*, New York, v. 16, p. 1217–1241, Aug. 1977.
- [59] FRADKIN, E. H.; KADANOFF, L. P. Disorder variables and parafermions in two-dimensional statistical mechanics. *Nucl. Phys. B*, Amsterdam, v. 170, n. 1, p. 1–15, Aug. 1980.
- [60] POTTS, R. B. Some generalized order-disorder transformations. *Proc. Cambridge Philos. Soc.*, London, v. 48, n. 1, p. 106–109, Jan. 1952.
- [61] KOSTERLITZ, J. M.; THOULESS, D. J. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. *J. Phys. C*, London, v. 6, n. 7, p. 1181–1203, Apr. 1973.
- [62] WEGNER, F. J. Duality in generalized Ising models and phase transitions without local order parameters. *J. Math. Phys.*, New York, v. 12, n. 10, p. 2259–2272, Oct. 1971.
- [63] KIBBLE, T. W. B. Lorentz invariance and the gravitational field. *J. Math. Phys.*, New York, v. 2, n. 2, p. 212–221, Mar./Apr. 1961.
- [64] IVANENKO, D.; SARDANASHVILY, G. The gauge treatment of gravity. *Phys. Rep.*, Amsterdam, v. 94, n. 1, p. 1–45, Jan. 1983.
- [65] ABERS, E. S.; LEE, B. W. Gauge theories. *Phys. Rep.*, Amsterdam, v. 9, n. 1, p. 1–141, Nov. 1973.
- [66] 't HOOFT, G.; VELTMAN, M. Regularization and renormalization of gauge fields. *Nucl. Phys. B*, Amsterdam, v. 44, n. 1, p. 189–213, July 1972.
- [67] LANG, C. B.; REBBI, C. Potential and restoration of rotational symmetry in SU(2) lattice gauge theory. *Phys. Lett. B*, Amsterdam, v. 115, n. 2, p. 137–142, Aug. 1982.
- [68] SCHIERHOLZ, G.; TEPER, M. On the restoration of Lorentz invariance in SU(2) and SU(3) lattice gauge theories. *Phys. Lett. B*, Amsterdam, v. 136, n. 1/2, p. 69–72, Feb. 1984.
- [69] LÜSCHER, M.; WEISZ, P. On-shell improved lattice gauge theories. *Commun. Math. Phys.*, Berlin, v. 97, n. 1/2, p. 59–77, Jan. 1985.
- [70] GELFAND, I. M.; YAGLOM, A. M. Integration in functional spaces and its applications in quantum physics. *J. Math. Phys.*, New York, v. 1, n. 1, p. 48–69, Jan./Feb. 1960.
- [71] GILMORE, R. *Lie groups, Lie algebras and some of their applications*. New York: John-Wiley, 1974.

- [72] GROSS, D. J.; WILCZEK, F. Ultraviolet behavior of non-abelian gauge theories. *Phys. Rev. Lett.*, New York, v. 30, n. 26, p. 1343–1346, June 1973.
- [73] GROSS, D. J.; WILCZEK, F. Asymptotically free gauge theories. I. *Phys. Rev. D*, New York, v. 8, n. 10, p. 3633–3652, Nov. 1973.
- [74] TEPER, M. J. SU(N) gauge theories in 2+1 dimensions. *Phys. Rev. D*, Melville, v. 59, n. 1, 014512 37p., Jan. 1999.
- [75] LUCINI, B.; TEPER, M. SU(N) gauge theories in 2+1 dimensions: further results. *Phys. Rev. D*, Melville, v. 66, n. 9, 097502 4p., Nov. 2002.
- [76] MIGDAL, A. A. Recursion equations in gauge field theories. *Sov. Phys. JETP*, New York, v. 42, n. 3, p. 413–418, Sept. 1975.
- [77] GROSS, D. J.; WITTEN, E. Possible third order phase transition in the large N lattice gauge theory. *Phys. Rev. D*, New York, v. 21, n. 2, p. 446–453, Jan. 1980.
- [78] BROWER, R.; ROSSI, P.; TAN, C.-I. The external field problem for QCD. *Nucl. Phys. B*, Amsterdam, v. 190, n. 4, p. 699–718, Dec. 1981.
- [79] DOSCH, H. G.; MULLER, V. F. Lattice gauge theory in two space-time dimensions. *Fortschr. Phys.*, Berlin, v. 27, n. 11, p. 547–559, Mar. 1979.
- [80] BARS, I.; GREEN, F. Complete integration of U(N) lattice gauge theory in a large n limit. *Phys. Rev. D*, New York, v. 20, n. 12, p. 3311–3330, Dec. 1979.
- [81] LANG, C. B.; SALOMONSON, P.; SKAGERSTAM, B. S. A study of exactly solvable lattice gauge theories in two space-time dimensions. *Phys. Lett. B*, Amsterdam, v. 100, n. 1, p. 29–33, Mar. 1981.
- [82] ERIKSSON, K. E.; SVARTHOLM, N.; SKAGERSTAM, B. S. On invariant group integrals in lattice QCD. *J. Math. Phys.*, New York, v. 22, n. 10, p. 2276–2278, Oct. 1981.
- [83] BARS, I. Exact evaluation of U(N) group integrals in lattice QCD. *Phys. Scr.*, Stockholm, v. 23, n. 5, p. 983–986, May 1981.
- [84] CREUTZ, M. Gauge fixing, the transfer matrix, and confinement on a lattice. *Phys. Rev. D*, New York, v. 15, n. 4, p. 1128–1136, Feb. 1977.
- [85] HAGIWARA, K. et al. Review of particle physics. *Phys. Rev. D*, Melville, v. 66, n. 1, 010001 974p., July 2002.
- [86] GROSS, D. J.; WILCZEK, F. Asymptotically free gauge theories. II. *Phys. Rev. D*, New York, v. 9, n. 4, p. 980–993, Feb. 1974.
- [87] LEHMANN, H.; SYMANZIK, K.; ZIMMERMANN, W. On the formulation of quantized field theories. *Nuovo Cimento*, Bologna, v. 1, n. 1, p. 205–225, genn. 1955.

- [88] RAMOND, P. *Field theory: a modern primer*. Reading: Benjamin/Cummings Publishing, 1981.
- [89] ELITZUR, S. Impossibility of spontaneously breaking local symmetries. *Phys. Rev. D*, New York, v. 12, n. 12, p. 3978–3982, Dec. 1975.
- [90] FADDEEV, L. D.; POPOV, V. N. Feynman diagrams for the Yang-Mills field. *Phys. Lett. B*, Amsterdam, v. 25, n. 1, p. 29–33, July 1967.
- [91] BECCHI, C.; ROUET, A.; STORA, R. Renormalization of the abelian Higgs-Kibble model. *Commun. Math. Phys.*, Berlin, v. 42, n. 2, p. 127–162, May 1975.
- [92] EICHTEN, E.; FEINBERG, F. Dynamical symmetry breaking of nonabelian gauge symmetries. *Phys. Rev. D*, New York, v. 10, n. 10, p. 3254–3279, Nov. 1974.
- [93] BAKER, M.; LEE, C.-K. Overlapping divergence free skeleton expansion in nonabelian gauge theories. *Phys. Rev. D*, New York, v. 15, n. 8, p. 2201–2234, Apr. 1977.
- [94] VINK, J. C.; WIESE, U.-J. Gauge fixing on the lattice without ambiguity. *Phys. Lett. B*, Amsterdam, v. 289, n. 1, p. 122–126, Sept. 1992.
- [95] ALEXANDROU, C.; DE FORCRAND, P.; FOLLANA, E. The gluon propagator without lattice Gribov copies on a finer lattice. *Phys. Rev. D*, Melville, v. 65, n. 9, 114508 5p., May 2002.
- [96] CUCCHIERI, A. Gribov copies in the minimal Landau gauge: the influence on gluon and ghost propagators. *Nucl. Phys. B*, v. 508, n. 1/2, p. 353–370, Dec. 1997.
- [97] PARISI, G.; WU, Y. Perturbation theory without gauge fixing. *Sci. Sin.*, Peking, v. 24, n. 4, p. 483–496, Apr. 1981.
- [98] ZWANZIGER, D. Covariant quantization of gauge fields without Gribov ambiguity. *Nucl. Phys. B*, Amsterdam, v. 192, n. 1, p. 259–269, Nov. 1981.
- [99] NAMIKI, M. et al. *Stochastic quantization*. Berlin: Springer-Verlag, 1992. (Lecture notes in physics, v. M9).
- [100] WEST, G. B. Confinement, the Wilson loop and the gluon propagator. *Phys. Lett. B*, Amsterdam, v. 115, n. 6, p. 468–472, Sept. 1982.
- [101] BAKER, M.; BALL, J. S.; ZACHARIASEN, F. A nonperturbative calculation of the infrared limit of the axial gauge gluon propagator. I. *Nucl. Phys. B*, Amsterdam, v. 186, n. 3, p. 531–559, Aug. 1981.
- [102] BAKER, M.; BALL, J. S.; ZACHARIASEN, F. A nonperturbative calculation of the infrared limit of the axial gauge gluon propagator. II. *Nucl. Phys. B*, Amsterdam, v. 186, n. 3, p. 560–572, Aug. 1981.

- [103] BAKER, M.; BALL, J. S.; ZACHARIASEN, F. An analytic calculation of the weak field limit of the static color dielectric constant. *Nucl. Phys. B*, Amsterdam, v. 226, n. 2, p. 455-465, Oct. 1983.
- [104] ALEKSEEV, A. I.; ARBUZOV, B. A.; BAIKOV, V. A. Infrared asymptotics of gluon Green's functions in quantum chromodynamics. *Theor. Math. Phys.*, New York, v. 52, n. 2, p. 739-746, Aug. 1982.
- [105] BUTTNER, K.; PENNINGTON, M. R. Infrared behavior of the gluon propagator: confining or confined? *Phys. Rev. D*, Woodbury, v. 52, n. 9, p. 5220-5228, Nov. 1995.
- [106] MANDELSTAM, S. Approximation scheme for QCD. *Phys. Rev. D*, New York, v. 20, n. 12, p. 3223-3238, Dec. 1979.
- [107] ATKINSON, D.; DROHM, J. K.; JOHNSON, P. W.; STAM, K. Nonperturbative confinement in quantum chromodynamics. I. Study of an approximate equation of Mandelstam. *J. Math. Phys.*, New York, v. 22, n. 11, p. 2704-2712, Nov. 1981.
- [108] BROWN, N.; PENNINGTON, M. R. Studies of confinement: how the gluon propagates. *Phys. Rev. D*, Woodbury, v. 39, n. 9, p. 2723-2736, May 1989.
- [109] CORNWALL, J. M. Dynamical mass generation in continuum QCD. *Phys. Rev. D*, New York, v. 26, n. 6, p. 1453-1478, Sept. 1982.
- [110] WATSON, N. J. The pinch technique approach to gauge-independent n-point functions. Disponível em: <<http://arxiv.org/hep-ph/9912303>>. Acesso em: 15 out. 2003.
- [111] DENNER, A.; WEIGLEIN, G.; DITTMAIER, S. Gauge invariance of Green functions: background field method versus pinch technique. *Phys. Lett. B*, Amsterdam, v. 333, n. 3, p. 420-426, Aug. 1994.
- [112] HASHIMOTO, S.; KODAIRA, J.; YASUI, Y.; SASAKI, K. The background field method: alternative way of deriving the pinch technique's results. *Phys. Rev. D*, Woodbury, v. 50, n. 11, p. 7066-7076, Dec. 1994.
- [113] STINGL, M. Propagation properties and condensate formation of the confined Yang-Mills field. *Phys. Rev. D*, Woodbury, v. 34, n. 12, p. 3863-3881, Dec. 1986.
- [114] VON SMEKAL, L.; ALKOFER, R.; HAUCK, A. The infrared behavior of gluon and ghost propagators in Landau gauge QCD. *Phys. Rev. Lett.*, Woodbury, v. 79, n. 19, p. 3591-3594, Nov. 1997.
- [115] VON SMEKAL, L.; HAUCK, A.; ALKOFER, R. A solution to coupled Dyson-Schwinger equations for gluons and ghosts in Landau gauge. *Ann. Phys.*, Orlando, v. 267, n. 1, p. 1-60, July 1998.

- [116] LERCHE, C.; VON SMEKAL, L. On the infrared exponent for gluon and ghost propagation in Landau gauge QCD. *Phys. Rev. D*, Melville, v. 65, n. 12, 125006 22p., June 2002.
- [117] ZWANZIGER, D. Vanishing of zero momentum lattice gluon propagator and color confinement. *Nucl. Phys. B*, Amsterdam, v. 364, n. 1, p. 127–161, Oct. 1991.
- [118] ALKOFER, R.; FISCHER, C. S.; VON SMEKAL, L. Kugo-Ojima confinement criterion, Zwanziger-Gribov horizon condition, and infrared critical exponents in Landau gauge qcd. Disponível em: <<http://arxiv.org/hep-ph/0301107>>. Acesso em: 15 out. 2003.
- [119] JAFFE, A. M.; WITTEN, E. Quantum Yang-Mills theory. Disponível em: <<http://www.claymath.org>>. Acesso em: 16 out. 2003.
- [120] MANDELSTAM, S. General introduction to confinement. *Phys. Rep.*, Amsterdam, v. 67, n. 1, p. 109–121, Dec. 1980.
- [121] GREENSITE, J. The confinement problem in lattice gauge theory. *Prog. Part. Nucl. Phys.*, Amsterdam, v. 51, n. 1, p. 1–83, 2003.
- [122] KUGO, T. The universal renormalization factors $Z(1) / Z(3)$ and color confinement condition in non-abelian gauge theory. Disponível em: <<http://arxiv.org/hep-th/9511033>>. Acesso em: 16 out. 2003.
- [123] VON SMEKAL, L.; ALKOFER, R. What the infrared behavior of QCD Green functions can tell us about confinement in the covariant gauge. Disponível em: <<http://arxiv.org/hep-ph/0009219>>. Acesso em: 16 out. 2003.
- [124] ZWANZIGER, D. Renormalizability of the critical limit of lattice gauge theory by BRS invariance. *Nucl. Phys. B*, Amsterdam, v. 399, n. 2, p. 477–513, July 1993.
- [125] VAN BAAL, P. More (thoughts on) Gribov copies. *Nucl. Phys. B*, Amsterdam, v. 369, n. 1, p. 259–275, Jan. 1992.
- [126] CUCCHIERI, A. Numerical study of the fundamental modular region in the minimal Landau gauge. *Nucl. Phys. B*, Amsterdam, v. 521, n. 1, p. 365–379, June 1998.
- [127] KOGUT, J. B.; SINCLAIR, D. K.; TEPER, M. Glueballs, mesons and the string tension: An exploratory study of lattice QCD with two colors and four light flavors. *Phys. Rev. D*, Woodbury, v. 44, n. 9, p. 2869–2878, Nov. 1991.
- [128] HANDS, S.; KOGUT, J. B.; LOMBARDO, M.-P.; MORRISON, S. E. Symmetries and spectrum of $SU(2)$ lattice gauge theory at finite chemical potential. *Nucl. Phys. B*, Amsterdam, v. 558, n. 1, p. 327–346, Oct. 1999.
- [129] GUPTA, R. General physics motivations for numerical simulations of quantum field theory. Disponível em: <<http://arxiv.org/hep-lat/9905027>>. Acesso em: 16 out. 2003.

- [130] SHARPE, S. R. Progress in lattice gauge theory. Disponível em: <<http://arxiv.org/hep-lat/9811006>>. Acesso em: 15 out. 2003.
- [131] AOKI, S. et al. Quenched light hadron spectrum. *Phys. Rev. Lett.*, Melville, v. 84, n. 2, p. 238–241, Jan. 2000.
- [132] MacFARLANE, A. J.; WOO, G. Φ^3 theory in six-dimensions and the renormalization group. *Nucl. Phys. B*, Amsterdam, v. 77, n. 1, p. 91–108, July 1974.
- [133] FEYNMAN, R. P. The qualitative behavior of Yang-Mills theory in (2+1)- dimensions. *Nucl. Phys. B*, Amsterdam, v. 188, n. 3, p. 479–512, Oct. 1981.
- [134] MANDULA, J. E.; OGILVIE, M. The gluon is massive: a lattice calculation of the gluon propagator in the Landau gauge. *Phys. Lett. B*, Amsterdam, v. 185, n. 1, p. 127–132, Feb. 1987.
- [135] MANDULA, J. E.; OGILVIE, M. The gluon propagator at finite temperature. *Phys. Lett. B*, Amsterdam, v. 201, n. 1, p. 117–122, Jan. 1988.
- [136] BERNARD, C. W.; PARRINELLO, C.; SONI, A. A lattice study of the gluon propagator in momentum space. *Phys. Rev. D*, Woodbury, v. 49, n. 3, p. 1585–1593, Feb. 1994.
- [137] CUCCHIERI, A.; ZWANZIGER, D. Numerical study of gluon propagator and confinement scenario in minimal Coulomb gauge. *Phys. Rev. D*, Melville, v. 65, n. 2, 014001 11p., Jan. 2002.
- [138] CUCCHIERI, A.; ZWANZIGER, D. Fit to gluon propagator and Gribov formula. *Phys. Lett. B*, Amsterdam, v. 524, n. 1/2, p. 123–128, Jan. 2002.
- [139] CUCCHIERI, A.; ZWANZIGER, D. Gluon propagator and confinement scenario in Coulomb gauge. *Nucl. Phys. B, Proc. Suppl.*, Amsterdam, n. 119, p. 727–729, May 2003.
- [140] ALEXANDROU, C.; DE FORCRAND, P.; FOLLANA, E. The laplacian gauge gluon propagator in $SU(N_c)$. *Phys. Rev. D*, Melville, v. 65, n. 11, 117502 4p., June 2002.
- [141] ALEXANDROU, C.; DE FORCRAND, P.; FOLLANA, E. The gluon propagator without lattice Gribov copies. *Phys. Rev. D*, Melville, v. 63, n. 9, 094504 8p., May 2001.
- [142] WILSON, K. G. Monte-Carlo calculations for the lattice gauge theory. In: *Recent developments in gauge theories*. New York: Plenum, 1980. p. 363-402. (NATO advanced study institutes series: series B, physics, v. 59).
- [143] BERNARD, C. W. Monte Carlo evaluation of the effective gluon mass. *Phys. Lett. B*, Amsterdam, v. 108, n. 6, p. 431–434, Feb. 1982.

- [144] MANDULA, J. E.; OGILVIE, M. Efficient gauge fixing via overrelaxation. *Phys. Lett. B*, Amsterdam, v. 248, n. 1/2, p. 156–158, Sept. 1990.
- [145] NAKAMURA, A.; PLEWNIA, M. Gauge fixing ambiguity and photon propagators in compact U(1) lattice gauge theory. *Phys. Lett. B*, Amsterdam, v. 255, n. 2, p. 274–278, Feb. 1991.
- [146] PARRINELLO, C.; PETRARCA, S.; VLADIKAS, A. A preliminary study of the Gribov ambiguity in lattice SU(3) Coulomb gauge. *Phys. Lett. B*, Amsterdam, v. 268, n. 2, p. 236–240, Oct. 1991.
- [147] MARINARI, E.; PARRINELLO, C.; RICCI, R. Evidence for the existence of Gribov copies in Landau gauge lattice QCD. *Nucl. Phys. B*, Amsterdam, v. 362, n. 1/2, p. 487–497, Sept. 1991.
- [148] PACIELLO, M. L.; PARRINELLO, C.; PETRARCA, S.; TAGLIENTI, B.; VLADIKAS, A. SU(3) lattice gauge fixing with overrelaxation and Gribov copies. *Phys. Lett. B*, Amsterdam, v. 276, n. 1/2, p. 163–167, Feb. 1992.
- [149] MARENZONI, P.; MARTINELLI, G.; STELLA, N. The gluon propagator on a large volume, at $\beta = 6.0$. *Nucl. Phys. B*, Amsterdam, v. 455, n. 1/2, p. 339–356, Nov. 1995.
- [150] SUMAN, H.; SCHILLING, K. First lattice study of ghost propagators in SU(2) and SU(3) gauge theories. *Phys. Lett. B*, Amsterdam, v. 373, n. 4, p. 314–318, Apr. 1996.
- [151] CUCCHIERI, A. Infrared behavior of the gluon propagator in lattice Landau gauge. *Phys. Lett. B*, Amsterdam, v. 422, n. 1/4, p. 233–237, Mar. 1998.
- [152] BONNET, F. D. R.; BOWMAN, P. O.; LEINWEBER, D. B.; WILLIAMS, A. G. Infrared behavior of the gluon propagator on a large volume lattice. *Phys. Rev. D*, Melville, v. 62, n. 5, 051501 4p., Sept. 2000.
- [153] LEPAGE, G. P.; MACKENZIE, P. B. On the viability of lattice perturbation theory. *Phys. Rev. D*, Woodbury, v. 48, n. 5, p. 2250–2264, Sept. 1993.
- [154] ZWANZIGER, D. Renormalization in the Coulomb gauge and order parameter for confinement in QCD. *Nucl. Phys. B*, Amsterdam, v. 518, n. 1/2, p. 237–272, May 1998.
- [155] ZWANZIGER, D. No confinement without Coulomb confinement. *Phys. Rev. Lett.*, Melville, v. 90, n. 10, 102001 4p., Mar. 2003.
- [156] VINK, J. C. Investigation of laplacian gauge fixing for U(1) and SU(2) gauge fields. *Phys. Rev. D*, Woodbury, v. 51, n. 3, p. 1292–1297, Feb. 1995.
- [157] ALEXANDROU, C.; DE FORCRAND, P.; FOLLANA, E. The infrared behaviour of the gluon propagator in SU(2) and SU(3) without lattice Gribov copies. Disponível em: <<http://arxiv.org/hep-lat/0009003>>. Acesso em: 15 out. 2003.

- [158] MANDULA, J. E. The relationship of the laplacian gauge to the Landau gauge. *Nucl. Phys. B, Proc. Suppl.*, Amsterdam, n. 106, p. 998–1000, Mar. 2002.
- [159] BOWMAN, P. O.; HELLER, U. M.; LEINWEBER, D. B.; WILLIAMS, A. G. Gluon propagator on coarse lattices in laplacian gauges. *Phys. Rev. D*, Melville, v. 66, n. 7, 074505 8p., Oct. 2002.
- [160] SEILER, E.; STAMATESCU, I. O.; ZWANZIGER, D. Monte carlo simulation of noncompact QCD with stochastic gauge fixing. *Nucl. Phys. B*, Amsterdam v. 239, n. 1, p. 177–200, June 1984.
- [161] MIZUTANI, M.; NAKAMURA, A. Stochastic gauge fixing for compact lattice gauge theories. *Nucl. Phys. B, Proc. Suppl.*, Amsterdam, n. 34, p. 253–255, Apr. 1994.
- [162] NAKAMURA, A. et al. Gluon propagators and confinement. Disponível em: <<http://arxiv.org/hep-lat/9506024>>. Acesso em: 16 out. 2003.
- [163] WEINZIERL, S. Introduction to Monte Carlo methods. Disponível em: <<http://arxiv.org/hep-ph/0006269>>. Acesso em: 15 out. 2003.
- [164] SOKAL, A. D. Monte Carlo methods in statistical mechanics: foundations and new algorithms. Disponível em: <<http://www.fisica.uniud.it/~ercolessi/MC/sokal.ps.gz>>. Acesso em: 15 out. 2003.
- [165] BOAS, M. *Mathematical methods in the physical sciences*. 2. ed. New York: John Wiley, 1966.
- [166] MULLER-KRUMBHAAR, H.; BINDER, K. Dynamics properties of the Monte Carlo method in statistical mechanics. *J. Stat. Phys.*, New York, v. 8, p. 1–30, May 1973.
- [167] QUENOUILLE, M. Notes on bias in estimation. *Biometrika*, London, v. 43, n. 3/4, p. 353–360, 1956.
- [168] TUKEY, J. Bias and confidence in not-quite large samples. *Ann. Math. Stat.*, Ann Arbor, v. 29, n. 2, p. 614–614, 1958.
- [169] MILLER, R. The jackknife: a review. *Biometrika*, London, v. 61, n. 1, p. 1–15, 1974.
- [170] EFRON, B. Bootstrap methods - another look at the jackknife. *Ann. Stat.*, Hayward, v. 7, n. 1, p. 1–26, 1979.
- [171] JAMES, F. A review of pseudorandom number generators. *Comp. Phys. Comm.*, Amsterdam, v. 60, n. 3, p. 329–344, Oct. 1990.
- [172] MATSUMOTO, M.; NISHIMURA, T. Mersenne twister: a 623-dimensionally equi-distributed uniform pseudo-random number generator. *ACM Trans. Model. Comput. Simul.*, New York, v. 8, n. 1, p. 3–30, 1998.

- [173] LEHMER, D. H. Mathematical methods in large-scale computing units. *Annu. Comput. Lab. Harvard Univ.*, Cambridge, v. 26, p. 141–146, 1951.
- [174] MARSAGLIA, G.; ZAMAN, A. A new class of random number generators. *Ann. Appl. Probab.*, [S.l.], v. 1, p. 462–480, 1991.
- [175] LUSCHER, M. A portable high quality random number generator for lattice field theory simulations. *Comp. Phys. Commun.*, Amsterdam, v. 79, n. 1, p. 100–110, Feb. 1994.
- [176] TEZUKA, S.; L'ECUYER, P.; COUTURE, R. On the lattice structure of the add-with-carry and subtract-with-borrow random number generators. *ACM Trans. Model. Comput. Simul.*, New York, v. 3, n. 4, p. 315–331, 1993.
- [177] MARSAGLIA, G. Random numbers fall mainly in planes. *Proc. Nat. Acad. Sci.*, Washington, v. 61, n. 1, p. 25–30, Sept./Dec. 1968.
- [178] METROPOLIS, N.; ROSENBLUTH, A. W.; ROSENBLUTH, M. N.; TELLER, A. H.; TELLER, E. Equation of state calculations by fast computing machines. *J. Chem. Phys.*, New York, v. 21, n. 6, p. 1087–1092, June 1953.
- [179] CREUTZ, M. Monte Carlo study of quantized SU(2) gauge theory. *Phys. Rev. D*, New York, v. 21, n. 8, p. 2308–2315, Apr. 1980.
- [180] KENNEDY, A. D.; PENDLETON, B. J. Improved heat bath method for Monte Carlo calculations in lattice gauge theories. *Phys. Lett. B*, Amsterdam, v. 156, n. 5/6, p. 393–399, June 1985.
- [181] EDWARDS, R. G.; FERREIRA, S. J.; GOODMAN, J.; SOKAL, A. D. Multi-grid Monte Carlo. III. Two-dimensional O(4)-symmetric non-linear Sigma-model. *Nucl. Phys. B*, Amsterdam, v. 380, n. 3, p. 621–664, Aug. 1992.
- [182] ADLER, S. L. An overrelaxation method for the Monte Carlo evaluation of the partition function for multiquadratic actions. *Phys. Rev. D*, New York, v. 23, n. 12, p. 2901–2904, June 1981.
- [183] CREUTZ, M. Overrelaxation and Monte Carlo simulation. *Phys. Rev. D*, Woodbury, v. 36, n. 2, p. 515–519, July 1987.
- [184] GUPTA, R. et al. The hadron spectrum on a $18^*3 \times 42$ lattice. *Phys. Rev. D*, Woodbury, v. 36, n. 9, p. 2813–2827, Nov. 1987.
- [185] DE FORCRAND, P. Multigrid techniques for quark propagator. *Nucl. B, Phys. Proc. Suppl.*, Amsterdam, n. 9, p. 516–520, June 1989.
- [186] DAVIES, C. T. H. et al. Fourier acceleration in lattice gauge theories. I. Landau gauge fixing. *Phys. Rev. D*, Woodbury, v. 37, n. 6, p. 1581–1588, Mar. 1988.
- [187] GOODMAN, J.; SOKAL, A. D. Multigrid Monte Carlo method: conceptual foundations. *Phys. Rev. D*, Woodbury, v. 40, n. 6, p. 2035–2071, Sept. 1989.

- [188] HULSEBOS, A.; LAURSEN, M. L.; SMIT, J. $SU(N)$ multigrid Landau gauge fixing. *Phys. Lett. B*, Amsterdam, v. 291, n. 4, p. 431–436, Oct. 1992.
- [189] CUCCHIERI, A.; MENDES, T. Critical slowing-down in $SU(2)$ Landau gauge-fixing algorithms. *Nucl. Phys. B*, Amsterdam, v. 471, n. 1/2, p. 263–292, July 1996.
- [190] CUCCHIERI, A.; MENDES, T. Critical slowing-down in $SU(2)$ Landau-gauge-fixing algorithms at $\beta = \infty$. *Comp. Phys. Commun.*, Amsterdam, v. 154, n. 1, p. 1–48, July 2003.
- [191] FODOR, Z.; KATZ, S. D.; PAPP, G. Better than \$1/mflops sustained: A scalable pc-based parallel computer for lattice QCD. *Comp. Phys. Commun.*, Amsterdam, v. 152, n. 2, p. 121–134, May 2003.
- [192] DONGARRA, J.; BUNCH, J.; MOLER, C.; STEWART, G. W. *Linpac user's guide*. Philadelphia: SIAM, 1979.
- [193] DONGARRA, J. Performance of various computers using standard linear equations software. Disponível em: <<http://www.netlib.org/benchmark/performance.ps>>. Acesso em: 15 out. 2003.
- [194] HIOKI, S. Construction of staples in lattice gauge theory on a parallel computer. *Nucl. Phys. B, Proc. Suppl.*, Amsterdam, n. 42, p. 870–872, Apr. 1995.
- [195] HIOKI, S. Construction of staples in lattice gauge theory on a parallel computer. *Parallel Comp.*, Amsterdam, v. 22, n. 10, p. 1335–1344, Dec. 1996.
- [196] HUANG, K. *Statistical mechanics*. 2. ed. New York: John Wiley, 1987.
- [197] NIELSEN, N. K. On the gauge dependence of spontaneous symmetry breaking in gauge theories. *Nucl. Phys. B*, Amsterdam, v. 101, n. 1, p. 173–188, Dec. 1975.
- [198] KOBES, R.; KUNSTATTER, G.; REBHAN, A. QCD plasma parameters and the gauge dependent gluon propagator. *Phys. Rev. Lett.*, Woodbury, v. 64, n. 25, p. 2992–2995, June 1990.
- [199] BECIREVIC, D. et al. Asymptotic behaviour of the gluon propagator from lattice QCD. *Phys. Rev. D*, Melville, v. 60, n. 9, 094509 10p., Nov. 1999.
- [200] MA, J. P. A study of gluon propagator on coarse lattice. *Mod. Phys. Lett. A*, Singapore, v. 15, n. 4, p. 229–244, Feb. 2000.
- [201] BROCKMANN, R.; FRANK, J. Lattice quantum hadrodynamics. *Phys. Rev. Lett.*, Woodbury, v. 68, n. 12, p. 1830–1833, Mar. 1992.
- [202] BITAR, K. M.; VRANAS, P. M. A study of the Nambu-Jona-Lasinio model on the lattice. *Phys. Rev. D*, Woodbury, v. 50, n. 5, p. 3406–3421, Sept. 1994.

- [203] IZUBUCHI, T.; NOAKI, J.; UKAWA, A. Two-dimensional lattice Gross-Neveu model with Wilson fermion action at finite temperature and chemical potential. *Phys. Rev. D*, Woodbury, v. 58, n. 11, 114507 12p., Dec. 1998.
- [204] IZUBUCHI, T.; NAGAI, K.-I. Two dimensional lattice Gross-Neveu model with domain-wall fermions. *Phys. Rev. D*, Melville, v. 61, n. 9, 094501 16p., May 2000.
- [205] HANDS, S.; WALTERS, D. N. Evidence for BCS diquark condensation in the 3+1d lattice NJL model. *Phys. Lett. B*, Amsterdam, v. 548, n. 3/4, p. 196–203, Nov. 2002.
- [206] TAURINES, A. R.; VASCONCELLOS, C. A. Z.; MALHEIRO, M.; CHIAPPARINI, M. Neutron stars in a class of non-linear relativistic models. *Phys. Rev. C*, Melville, v. 63, n. 6, 065801 13p., June 2001.
- [207] TAURINES, A. R.; VASCONCELLOS, C. A. Z.; MALHEIRO, M.; CHIAPPARINI, M. Neutron stars with parametrized meson couplings. *Mod. Phys. Lett. A*, Singapore, v. 15, n. 29, p. 1789–1800, Sept. 2000.
- [208] ROCHA, S. S.; TAURINES, A. R.; VASCONCELLOS, C. A. Z.; PINTO, M. B.; DILLIG, M. The role of selfcouplings of scalar mesons in neutron star matter. *Mod. Phys. Lett. A*, Singapore, v. 17, n. 21, p. 1335–1344, July 2002.
- [209] MALHEIRO, M.; FIOLHAIS, M.; TAURINES, A. R. Metastable strange matter and compact quark stars. *J. Phys. G*, Bristol, v. 29, n. 6, p. 1045–1052, June 2003.
- [210] YANG, C.-N.; MILLS, R. L. Conservation of isotopic spin and isotopic gauge invariance. *Phys. Rev.*, New York, v. 96, n. 1, p. 191–195, Oct. 1954.
- [211] GRADSHTEYN, I. S.; RYZHIK, I. M. *Table of integrals, series, and products*. 4. ed. New York: Academic Press, 1965.
- [212] LEPAGE, G. P. Lattice QCD for novices. Disponível em: <<http://theory.fnal.gov/people/kronfeld/BUSSTEPP/Lepage1998.pdf>>. Acesso em: 15 out. 2003.
- [213] SAKURAI, J. J. *Modern quantum mechanics*. 2. ed. Reading: Addison-Wesley, 1994.