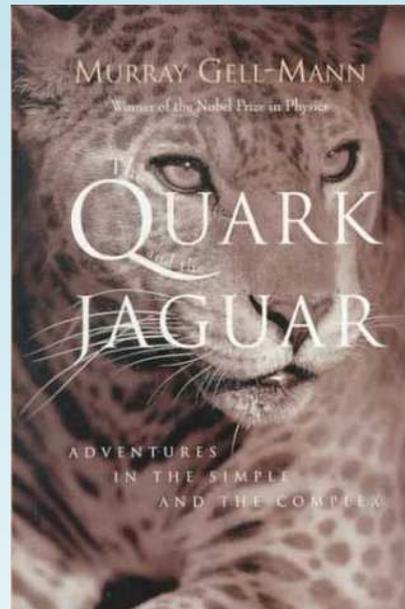


---

# O Quark e o Computador



Attilio Cucchieri e Tereza Mendes

<http://lattice.ifsc.usp.br/>

Instituto de Física de São Carlos – USP

---

# Quarks no Computador

- Estudo da Física de Partículas Elementares

---

# Quarks no Computador

- Estudo da Física de Partículas Elementares
- Estranhas propriedades dos quarks

---

# Quarks no Computador

- Estudo da Física de Partículas Elementares
- Estranhas propriedades dos quarks
- QCD na rede

---

# Quarks no Computador

- Estudo da Física de Partículas Elementares
- Estranhas propriedades dos quarks
- QCD na rede
- Simulações numéricas

---

# Quarks no Computador

- Estudo da Física de Partículas Elementares
- Estranhas propriedades dos quarks
- QCD na rede
- Simulações numéricas
- Resultados

---

# Modelo Padrão das Partículas Elementares:

**quarks** e **leptons** (férmions)

+ suas interações (bósons)

---

## Modelo Padrão das Partículas Elementares:

**quarks** e **leptons** (férmions)  
+ suas interações (bósons)

Prótons e nêutrons **não** são elementares,  
são formados por quarks!

---

Modelo Padrão das Partículas Elementares:

**quarks** e **leptons** (férmions)  
+ suas interações (bósons)

Prótons e nêutrons **não** são elementares,  
são formados por quarks!

**A (Nossa) Massa vem do Higgs??**

# Quarks: Estranhas Propriedades

---

# Quarks: Estranhas Propriedades

---

- carga elétrica fracionária (!!)

# Quarks: Estranhas Propriedades

---

- carga elétrica fracionária (!!)
- carga de cor (?)

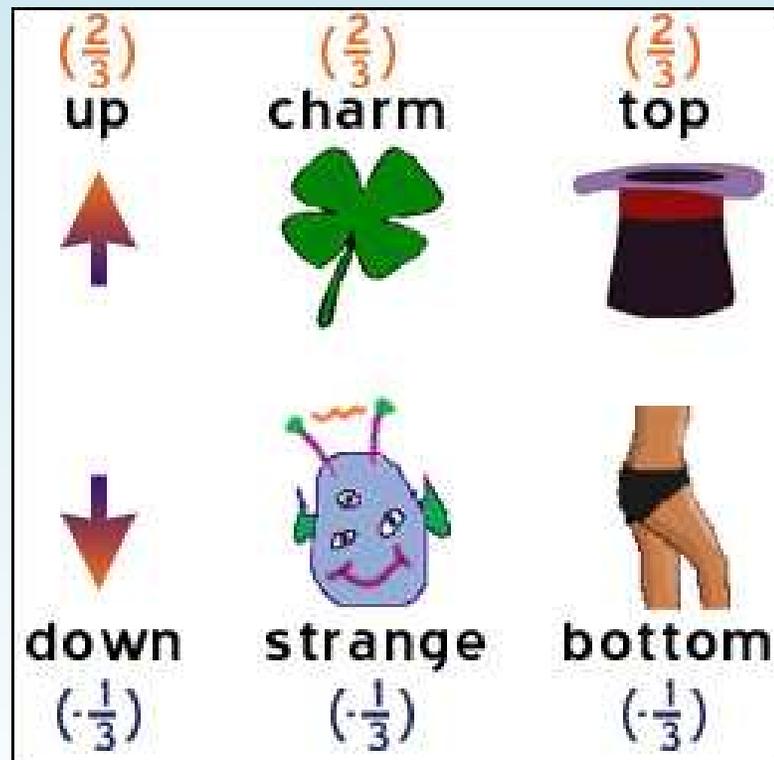
# Quarks: Estranhas Propriedades

---

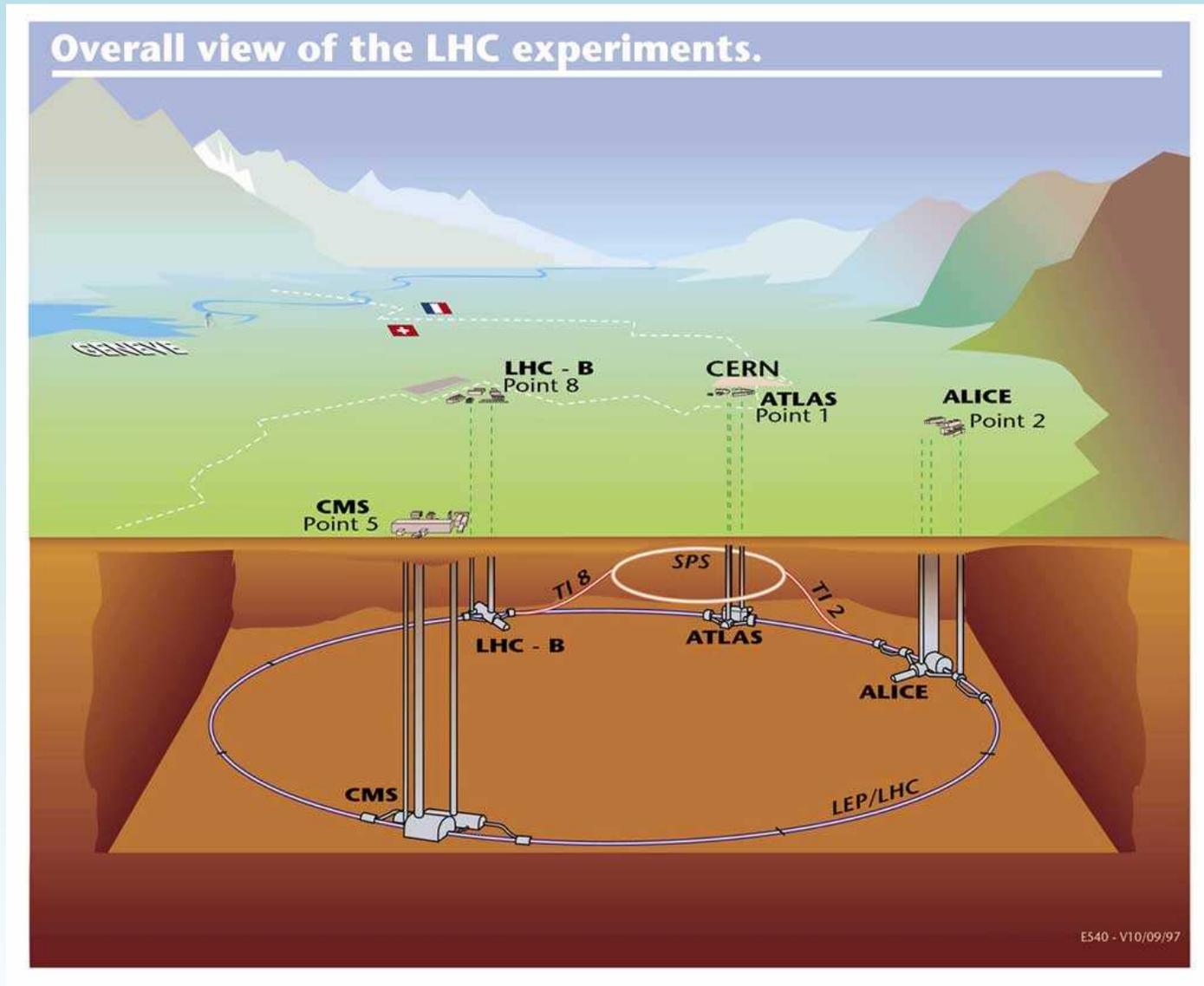
- carga elétrica fracionária (!!)
- carga de cor (?)
- não podem ser observados livres (!?)

# Quarks: Estranhas Propriedades

- carga elétrica fracionária (!!)
- carga de cor (?)
- não podem ser observados livres (!?)

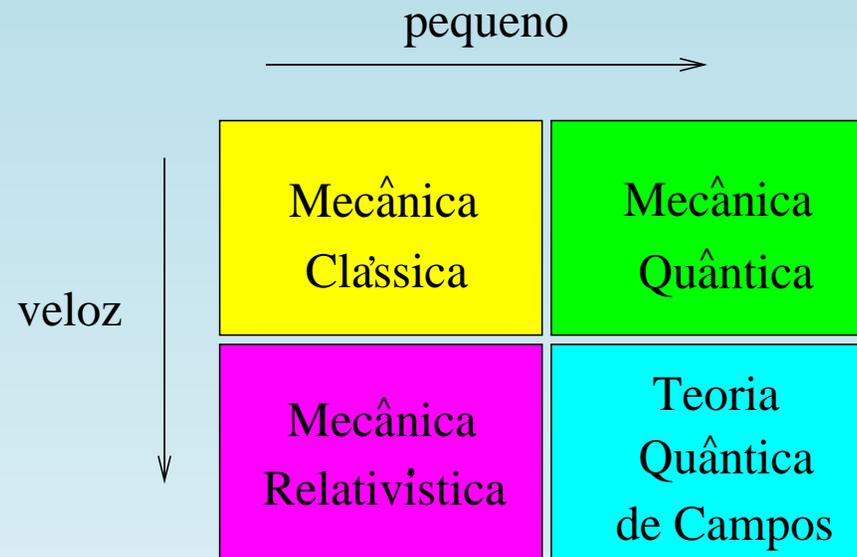


# Física das Partículas Elementares



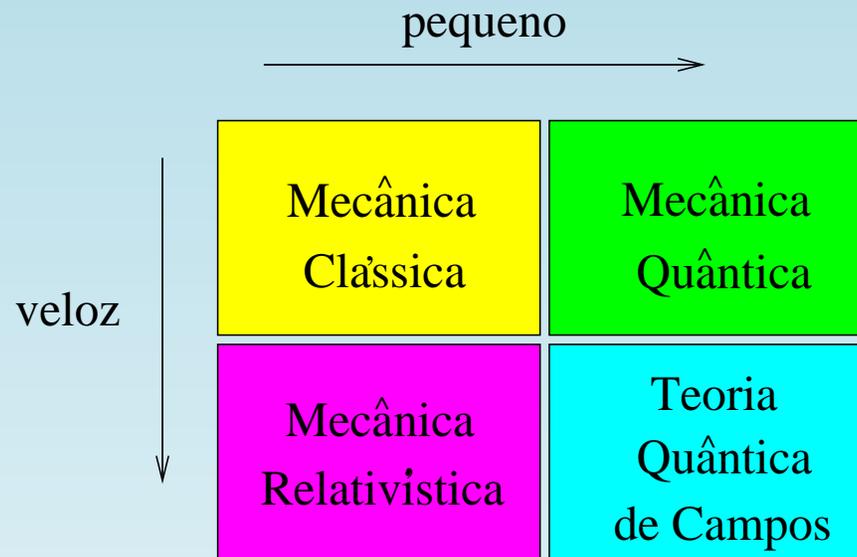
# Física de Partículas: Teoria

---



# Física de Partículas: Teoria

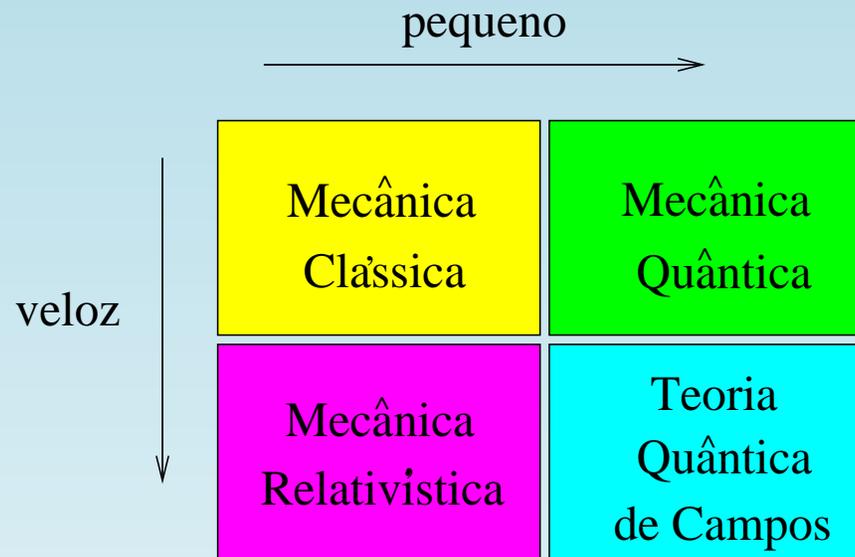
---



mecânica **quântica**: estado  $\psi$  (probabilístico)

# Física de Partículas: Teoria

---

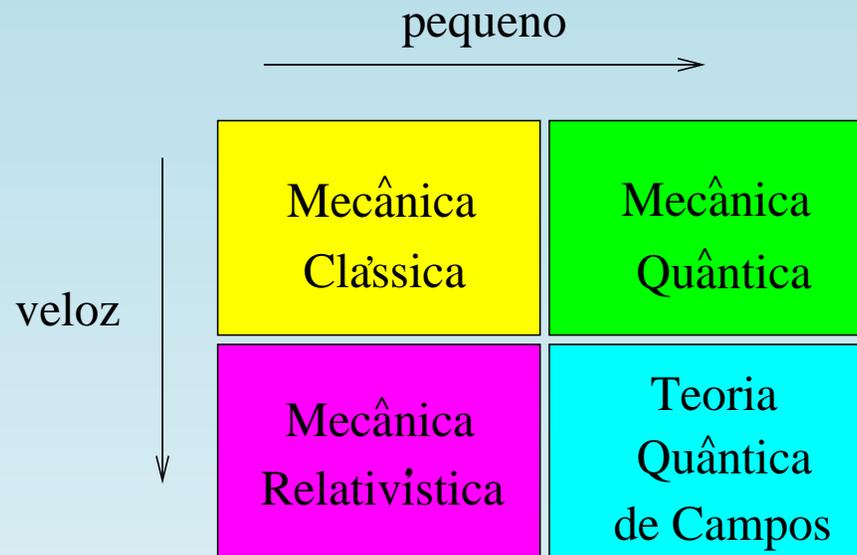


mecânica **quântica**: estado  $\psi$  (probabilístico)

mecânica **relativística**: não há conservação da massa ( $E = mc^2$ , partículas de massa zero)

# Física de Partículas: Teoria

---



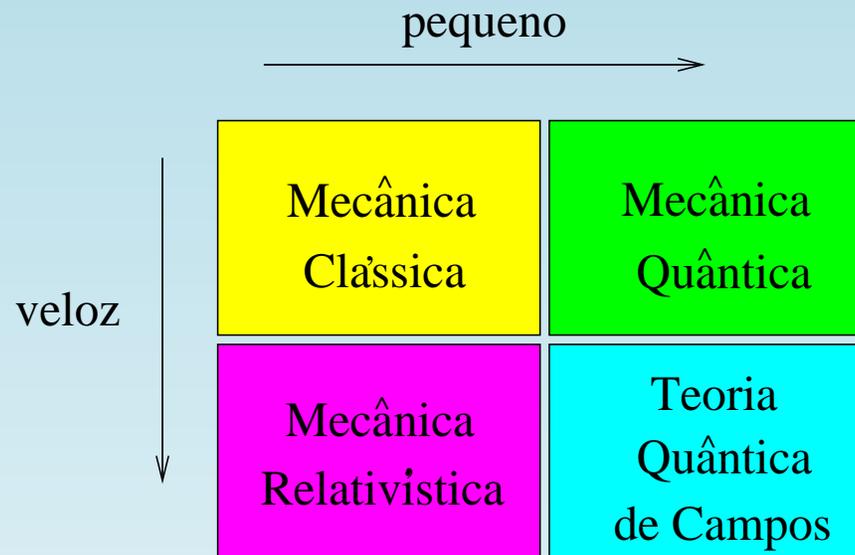
mecânica **quântica**: estado  $\psi$  (probabilístico)

mecânica **relativística**: não há conservação da massa ( $E = mc^2$ , partículas de massa zero)

TQC: **anti-partículas**, **spin** (princípio de Pauli), **simetria de gauge**

# Física de Partículas: Teoria

---



mecânica **quântica**: estado  $\psi$  (probabilístico)

mecânica **relativística**: não há conservação da massa ( $E = mc^2$ , partículas de massa zero)

TQC: **anti-partículas**, **spin** (princípio de Pauli), **simetria de gauge**

Partículas elementares são **idênticas**  $\Rightarrow$  importância das **simetrias** e leis de conservação (números quânticos)

# O que é uma interação?

---

## ■ Física clássica

- uma carga elétrica  $Q$  gera um **campo elétrico**  $\vec{E} \propto Q\hat{r}/r^2$ ;
- uma segunda carga  $q$  está sujeita a uma **força**  $\vec{F} = q\vec{E}$ ;
- o **alcance** é **infinito**.

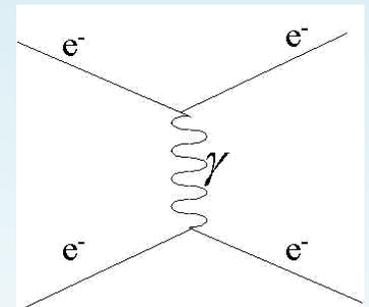
# O que é uma interação?

## ■ Física clássica

- uma carga elétrica  $Q$  gera um **campo elétrico**  $\vec{E} \propto Q\hat{r}/r^2$ ;
- uma segunda carga  $q$  está sujeita a uma **força**  $\vec{F} = q\vec{E}$ ;
- o **alcance** é **infinito**.

## ■ Física quântica

- as cargas  $Q$  e  $q$  trocam **fótons virtuais** (não observáveis), que carregam uma energia  $\Delta E$  por um intervalo de tempo  $\Delta t \lesssim \hbar/\Delta E$ ;
- sendo que o fóton não possui massa, o alcance  $r$  da força é **infinito**:  $r = c\Delta t \propto 1/\Delta E$ ;
- a **força** é dada por
$$F = \Delta p/\Delta t \propto \Delta E/\Delta t \propto 1/r^2.$$

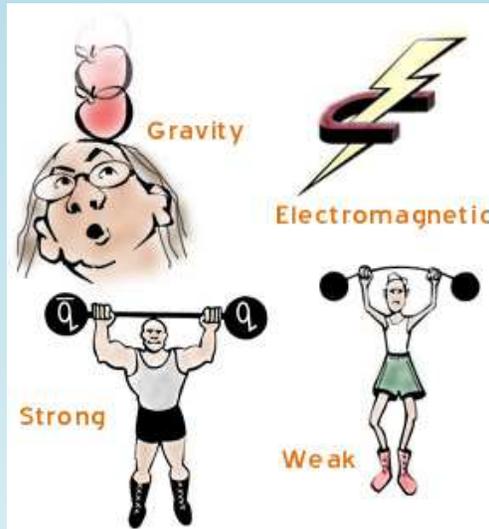


# O Modelo Padrão e a Força Forte

---

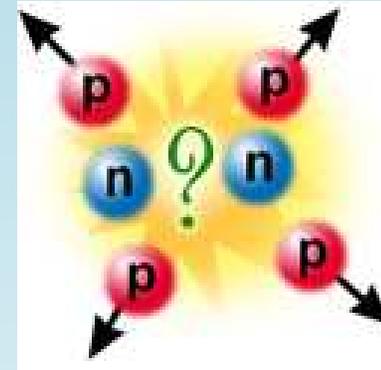
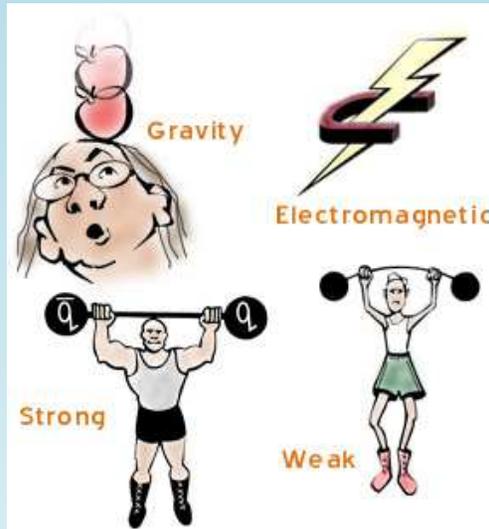
# O Modelo Padrão e a Força Forte

---

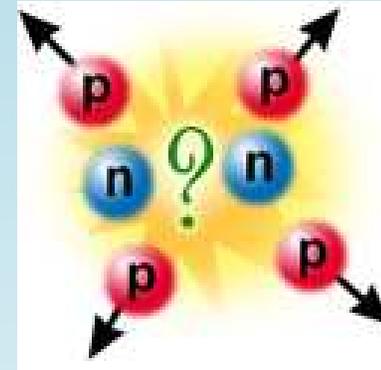
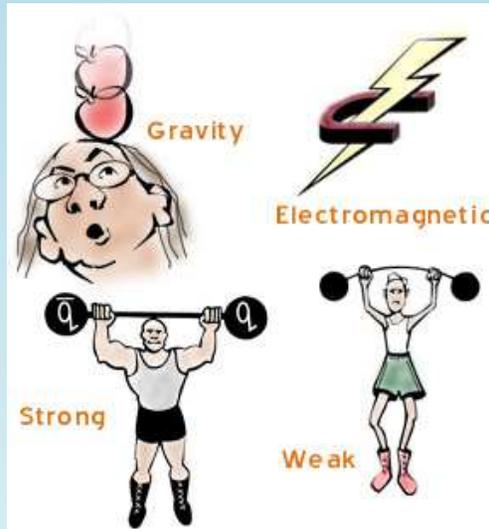


# O Modelo Padrão e a Força Forte

---

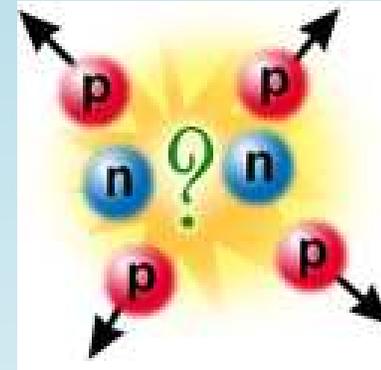
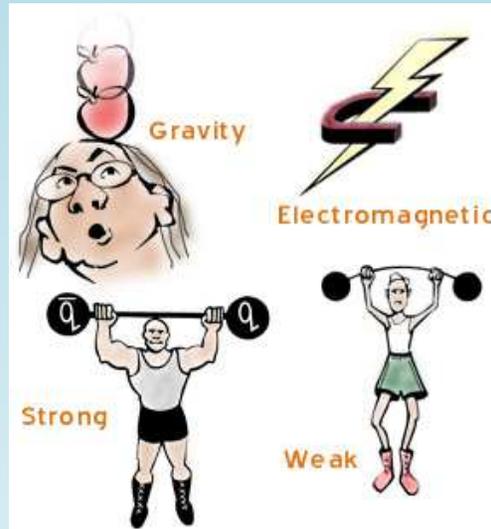


# O Modelo Padrão e a Força Forte



- Conjunto de Teorias Quânticas de Campos que descrevem 3 (das 4 conhecidas) interações fundamentais da natureza: as forças **electromagnética**, **fraca** e **forte**. Bem confirmado experimentalmente, incluindo o **bóson de Higgs**.

# O Modelo Padrão e a Força Forte



- Conjunto de Teorias Quânticas de Campos que descrevem 3 (das 4 conhecidas) interações fundamentais da natureza: as forças **electromagnética**, **fraca** e **forte**. Bem confirmado experimentalmente, incluindo o **bóson de Higgs**.
- Interação forte entre quarks é descrita pela **Cromodinâmica Quântica** (QCD), uma TQC baseada na **carga de cor**, que tem **3 valores possíveis** e é mediada pelos **glúons**.

# O Modelo de Quarks (Gell-Mann e Zweig, 1964)

---

**hádrons** (mésons e bárions) são **compostos**, a partir de 3 quarks (+ anti-quarks correspondentes): **up** ( $u$ ), **down** ( $d$ ) e **strange** ( $s$ ); os quarks têm spin  $1/2$ .

# O Modelo de Quarks (Gell-Mann e Zweig, 1964)

---

**hádrons** (mésons e bárions) são **compostos**, a partir de 3 quarks (+ anti-quarks correspondentes): **up** ( $u$ ), **down** ( $d$ ) e **strange** ( $s$ ); os quarks têm spin  $1/2$ .

- **méson** = quark + anti-quark
- **bárion** = três quarks

# O Modelo de Quarks (Gell-Mann e Zweig, 1964)

---

**hádrons** (mésons e bárions) são **compostos**, a partir de 3 quarks (+ anti-quarks correspondentes): **up** ( $u$ ), **down** ( $d$ ) e **strange** ( $s$ ); os quarks têm spin  $1/2$ .

- **méson** = quark + anti-quark
- **bárion** = três quarks

Quark	Carga relativa	$A$	$I$	$S$
$u$	$2/3$	$1/3$	$1/2$	$0$
$d$	$-1/3$	$1/3$	$1/2$	$0$
$s$	$-1/3$	$1/3$	$0$	$-1$

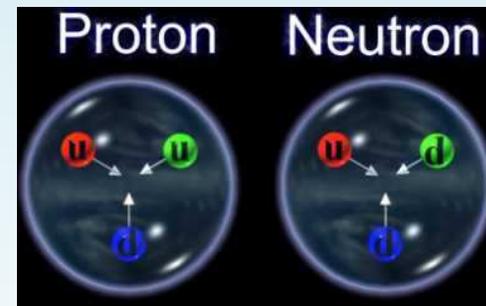
# O Modelo de Quarks (Gell-Mann e Zweig, 1964)

**hádrons** (mésons e bárions) são **compostos**, a partir de 3 quarks (+ anti-quarks correspondentes): **up** ( $u$ ), **down** ( $d$ ) e **strange** ( $s$ ); os quarks têm spin  $1/2$ .

- **méson** = quark + anti-quark
- **bárion** = três quarks

Quark	Carga relativa	$A$	$I$	$S$
$u$	$2/3$	$1/3$	$1/2$	$0$
$d$	$-1/3$	$1/3$	$1/2$	$0$
$s$	$-1/3$	$1/3$	$0$	$-1$

- **próton** =  $2 u + 1 d$ : carga elétrica =  $2 \times 2/3 + 1 \times (-1/3) = +1$
- **nêutron** =  $2 d + 1 u$ : carga elétrica =  $2 \times (-1/3) + 1 \times 2/3 = 0$



# O Modelo de Quarks (Gell-Mann e Zweig, 1964)

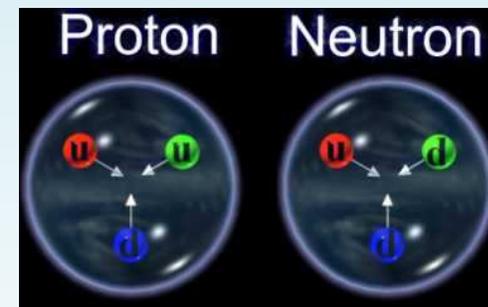
**hádrons** (mésons e bárions) são **compostos**, a partir de 3 quarks (+ anti-quarks correspondentes): **up** ( $u$ ), **down** ( $d$ ) e **strange** ( $s$ ); os quarks têm spin  $1/2$ .

- **méson** = quark + anti-quark
- **bárion** = três quarks

Quark	Carga relativa	$A$	$I$	$S$
$u$	$2/3$	$1/3$	$1/2$	$0$
$d$	$-1/3$	$1/3$	$1/2$	$0$
$s$	$-1/3$	$1/3$	$0$	$-1$

- **próton** =  $2 u + 1 d$ : carga elétrica =  $2 \times 2/3 + 1 \times (-1/3) = +1$

- **nêutron** =  $2 d + 1 u$ : carga elétrica =  $2 \times (-1/3) + 1 \times 2/3 = 0$

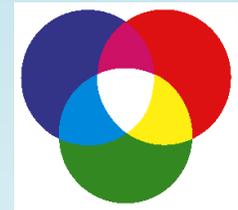


Explica o **momento magnético do nêutron**

# Quarks: evidências experimentais

## ■ Três cores

- a partícula  $\Delta^{++}$  é constituída de 3 quarks  $u$  e tem spin  $3/2$ ;
- a configuração  $\Delta^{++} = u \uparrow u \uparrow u \uparrow$  viola o **princípio de Pauli**;
- solução: cada quark tem um novo número quântico, a **carga de cor**;
- existem **3 cores** (vermelho, verde, azul) e 3 anti-cores (amarelo, magenta, ciano).

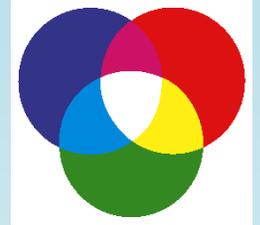


## ■ Três cores e carga elétrica fracionária

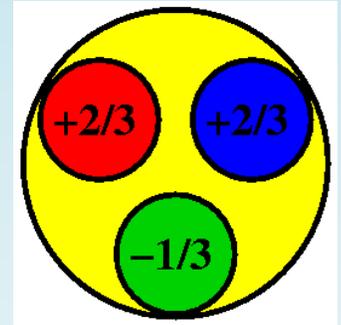
- a razão  $R = \frac{\sigma(e^+e^- \rightarrow q\bar{q} \rightarrow \text{hádrons})}{\sigma(e^+e^- \rightarrow \mu^+\mu^-)}$  é proporcional a  $N_c \sum_f q_f^2$ ;
- com uma energia de 10 GeV no centro de massa podemos produzir os quarks up, down, strange, charm e bottom e  $R$  é proporcional a  $3 \left[ 2 \left( \frac{2}{3} \right)^2 + 3 \left( \frac{1}{3} \right)^2 \right] = 11/3$ , de acordo com os experimentos.

# QCD: o Mistério do Próton

Interação forte entre prótons e nêutrons é um **resí-  
duo** da interação entre os quarks que os formam. Núcleons são formados por 3 quarks de **cores** diferentes.



O próton é um **estado ligado de quarks** interagindo através da troca de glúons (sem massa)



Propriedades curiosas:

- 99% da massa do estado ligado vem da **interação!**  
⇒ não somos **poeira de estrelas**, somos glúons!
- Quarks estão **confinados**

# Problema: quarks livres

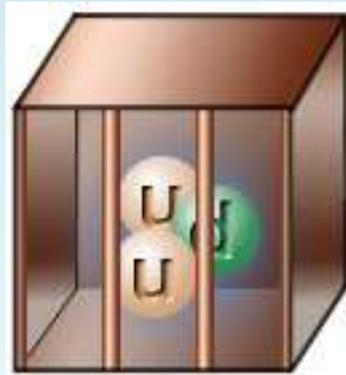
---

- Por que nunca foi observada uma carga elétrica fracionária?

# Problema: quarks livres

---

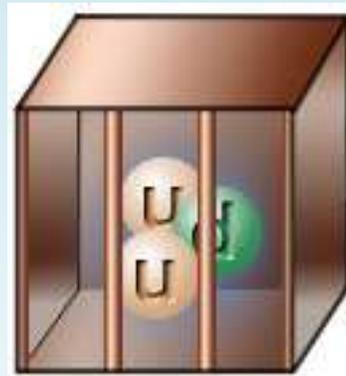
- Por que nunca foi observada uma carga elétrica fracionária?
- **Resposta:** os quarks estão **confinados** dentro dos hádrons!



# Problema: quarks livres

---

- Por que nunca foi observada uma carga elétrica fracionária?
- **Resposta:** os quarks estão **confinados** dentro dos hádrons!



- **Confinamento:** é necessária uma **energia infinita** para separar os quarks que constituem uma dada partícula.

# As massas dos hádrons

---

- A partícula  $J/\psi$  (estado ligado  $c\bar{c}$ ) tem massa  $\approx 3.1$  GeV

# As massas dos hádrons

---

- A partícula  $J/\psi$  (estado ligado  $c\bar{c}$ ) tem massa  $\approx 3.1$  GeV
- A massa do quark  $c$  é  $\approx 1.15 - 1.35$  GeV

# As massas dos hádrons

---

- A partícula  $J/\psi$  (estado ligado  $c\bar{c}$ ) tem massa  $\approx 3.1$  GeV
- A massa do quark  $c$  é  $\approx 1.15 - 1.35$  GeV
- A massa do próton (estado ligado  $uud$ ) é  $\approx 0.938$  GeV

# As massas dos hádrons

---

- A partícula  $J/\psi$  (estado ligado  $c\bar{c}$ ) tem massa  $\approx 3.1$  GeV
- A massa do quark  $c$  é  $\approx 1.15 - 1.35$  GeV
- A massa do próton (estado ligado  $uud$ ) é  $\approx 0.938$  GeV
- Considerando a massa dos quarks  $u$  e  $d$  temos  
 $2m_u + m_d \approx 10$  MeV !

# As massas dos hádrons

---

- A partícula  $J/\psi$  (estado ligado  $c\bar{c}$ ) tem massa  $\approx 3.1$  GeV
- A massa do quark  $c$  é  $\approx 1.15 - 1.35$  GeV
- A massa do próton (estado ligado  $uud$ ) é  $\approx 0.938$  GeV
- Considerando a massa dos quarks  $u$  e  $d$  temos
$$2m_u + m_d \approx 10 \text{ MeV !}$$

$\Rightarrow$  como explicar de onde vem a massa dos núcleons (i.e. a massa do universo visível)!??

# Liberdade assintótica

---

- A seção de choque do **espalhamento inelástico profundo** pode ser explicada imaginando que o próton seja constituído de **partículas livres** (R.P. Feynman, 1969) (pártons  $\rightarrow$  quarks).

# Liberdade assintótica

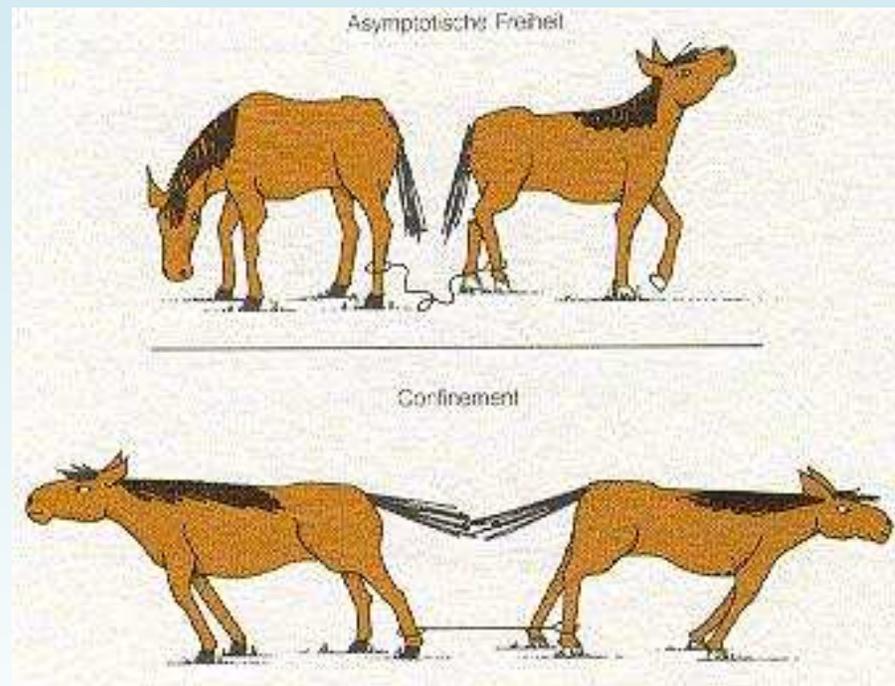
---

- A seção de choque do **espalhamento inelástico profundo** pode ser explicada imaginando que o próton seja constituído de **partículas livres** (R.P. Feynman, 1969) (pártons  $\rightarrow$  quarks).
- **D.J. Gross, H.D. Politzer e F. Wilczek** ganharam o **prêmio Nobel de Física de 2004**:

“for the discovery of asymptotic freedom in the theory of the strong interaction”

# Liberdade assintótica e confinamento

A altas energias (pequenas distâncias), quarks se comportam como **partículas livres**, mas a grandes distâncias a **força** torna-se **constante** e seria necessária uma energia infinita para separar dois quarks.



# Cromodinâmica Quântica (QCD)

---

A **força forte** entre os quarks é devida à **carga de cor**. A partícula mediadora é chamada de **glúon**.

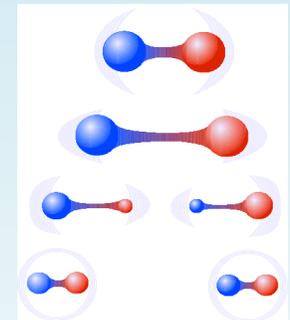
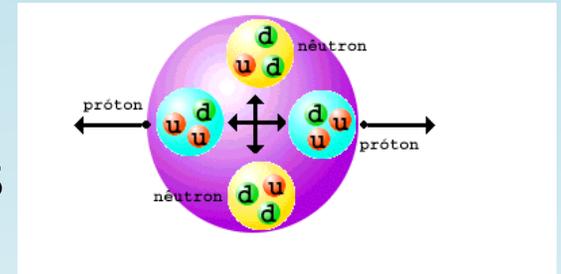
A teoria matemática que descreve a interação forte é chamada **Cromodinâmica Quântica** (QCD).

**Lagrangiana** da QCD é muito semelhante à da **Eletrodinâmica Quântica** (QED), que descreve o eletromagnetismo, trocando-se o **grupo de simetria**  $U(1)$  por  $SU(3)$ .

# Quarks e hádrons

Usando a QCD deveria ser possível:

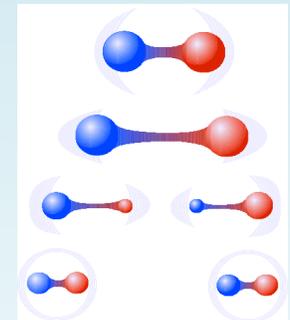
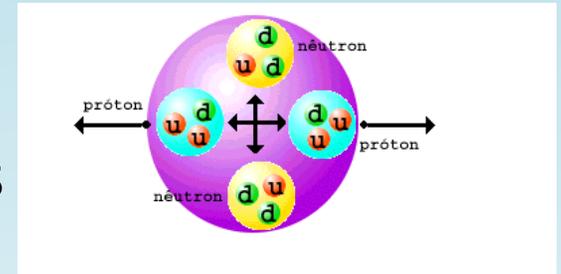
- obter um potencial  $q\bar{q}$  linear (**potencial de corda**) para  $r$  grande;
- explicar por que os hádrons contêm 2 ou 3 quarks/anti-quarks;
- prever o **confinamento** dos quarks;
- explicar a **força nuclear** (entre partículas sem carga de cor) como uma **interação residual** da força forte;
- prever a **quebra da corda**.



# Quarks e hádrons

Usando a QCD deveria ser possível:

- obter um potencial  $q\bar{q}$  linear (**potencial de corda**) para  $r$  grande;
- explicar por que os hádrons contêm 2 ou 3 quarks/anti-quarks;
- prever o **confinamento** dos quarks;
- explicar a **força nuclear** (entre partículas sem carga de cor) como uma **interação residual** da força forte;
- prever a **quebra da corda**.



**Como fazer as contas?**

# Lagrangiana da QCD

---

A QCD é descrita pela **Lagrangiana**

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4} F_{\mu\nu}^a F_a^{\mu\nu} + \sum_{f=1}^6 \bar{\psi}_f (i \gamma^\mu D_\mu - m_f) \psi_f$$

$$F_{\mu\nu}^a \equiv \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + g_0 f_{abc} A_\mu^b A_\nu^c$$

$$D_\mu \equiv \partial_\mu - i g_0 A_\mu^a T_a$$

que é **invariante** por **transformações locais de gauge**:

$$A_\mu^\Omega(x) = \Omega(x) A_\mu(x) \Omega^{-1}(x) - \frac{i}{g_0} [\partial_\mu \Omega(x)] \Omega^{-1}(x)$$

$$\psi_f^\Omega(x) = \Omega(x) \psi_f(x)$$

onde  $\Omega(x) = \exp[-i g_0 \Lambda^a(x) T_a] \in SU(3)$ .

# O problema da QCD

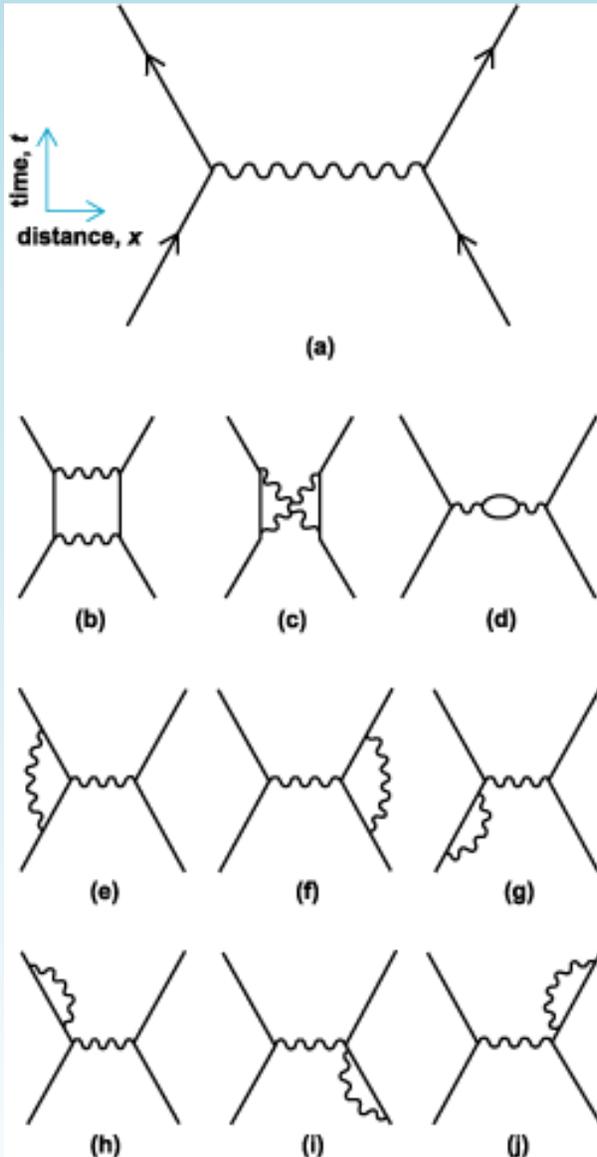
---

Os métodos usuais de teorias quânticas de campos — baseados em teoria de perturbações (tratamento de Feynman) — **falham** para a QCD no limite interessante para o estudo dos problemas acima 😞

Felizmente, será possível aplicar o **truque** de simulações de Monte Carlo, **partindo da formulação usual** e empregando a regularização de rede para a teoria

⇒ QCD na rede 😊

# Renormalização



Lagrangiana da QED:

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

onde

$$D_\mu \equiv \partial_\mu - i e A_\mu, \quad F_{\mu\nu} \equiv \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$$

Cálculo perturbativo: **diagramas de Feynman** para o espalhamento de elétrons; é possível **inferir** qual deve ser a **redefinição** de  $m$  e  $e$  para obter **respostas finitas**

# Opiniões

---

*I believe there is really no satisfactory quantum electrodynamics [...] I think that the renormalization theory is simply a way to sweep the difficulties of the divergences of electrodynamics under the rug. I am, of course, not sure of that.*

R. Feynman, Nobel lecture, 1965

# Opiniões

---

*I believe there is really no satisfactory quantum electrodynamics [...] I think that the renormalization theory is simply a way to sweep the difficulties of the divergences of electrodynamics under the rug. I am, of course, not sure of that.*

**R. Feynman**, Nobel lecture, 1965

*In the end the problem of infinities turned out to be not a disaster, but rather one of the best reasons for optimism about progress toward a final theory. When proper care is given to the definition of masses and charges and other constants the infinities all cancel, but **only** in theories of certain special kinds.*

**S. Weinberg**, Dreams of a Final Theory, 1992

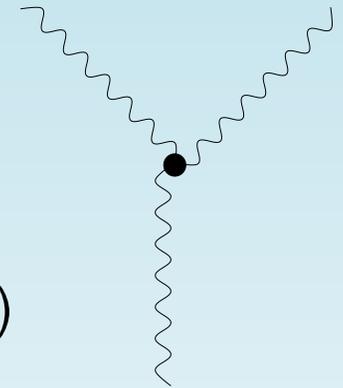
# Lagrangiana da QCD (II)

---

A Lagrangiana da QCD é semelhante à da QED mas além de termos **quadráticos** nos campos de glúon e de quarks (propagadores) aparecem termos com três e quatro campos de gauge:

$$\mathcal{L}_{AAA} = g_0 f_{abc} A_a^\mu A_b^\nu \partial_\mu A_\nu^c \quad (\text{vértice de três glúons})$$

$$\mathcal{L}_{\bar{\psi}\psi A} = g_0 \bar{\psi} \gamma^\mu A_\mu \psi \quad (\text{vértice de quark-quark-glúon})$$



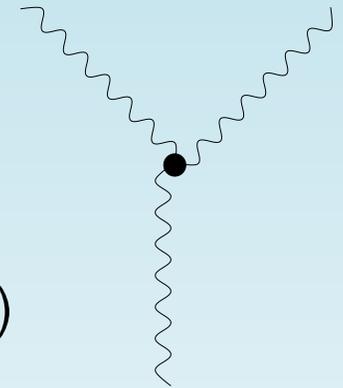
Os **vértices** com 3 e 4 partículas mediadoras (glúons) estão presentes somente nas teorias de gauge **não-abelianas**.

# Lagrangiana da QCD (II)

A Lagrangiana da QCD é semelhante à da QED mas além de termos **quadráticos** nos campos de glúon e de quarks (propagadores) aparecem termos com três e quatro campos de gauge:

$$\mathcal{L}_{AAA} = g_0 f_{abc} A_a^\mu A_b^\nu \partial_\mu A_\nu^c \quad (\text{vértice de três glúons})$$

$$\mathcal{L}_{\bar{\psi}\psi A} = g_0 \bar{\psi} \gamma^\mu A_\mu \psi \quad (\text{vértice de quark-quark-glúon})$$



Os **vértices** com 3 e 4 partículas mediadoras (glúons) estão presentes somente nas teorias de gauge **não-abelianas**.



Os **glúons** também têm carga de cor e **interagem entre eles!**  $\implies$   
Efeitos não-lineares!

# QCD vs. QED

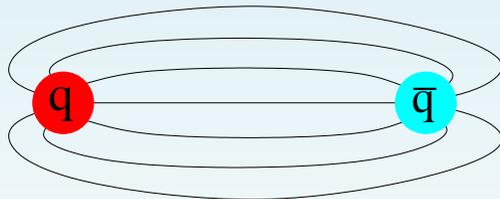
---

QCD (strong force)

quarks, gluons

$SU(3)$  (3 “colors”)

$m_q, \alpha_s(p)$

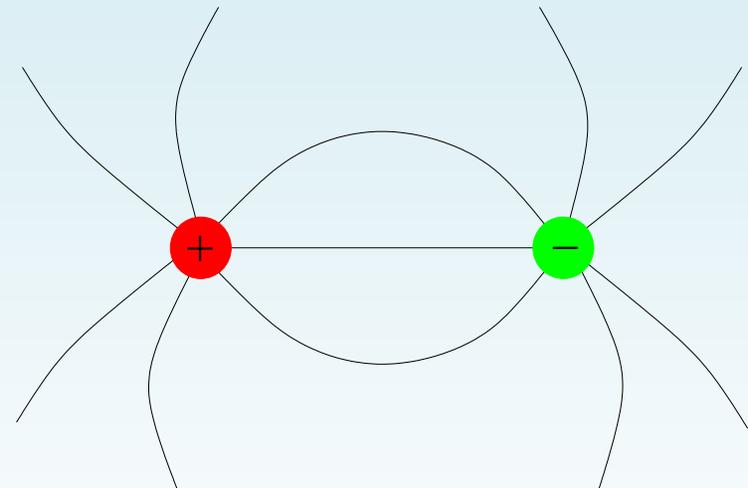


vs. QED (EM force)

electrons, photons

$U(1)$

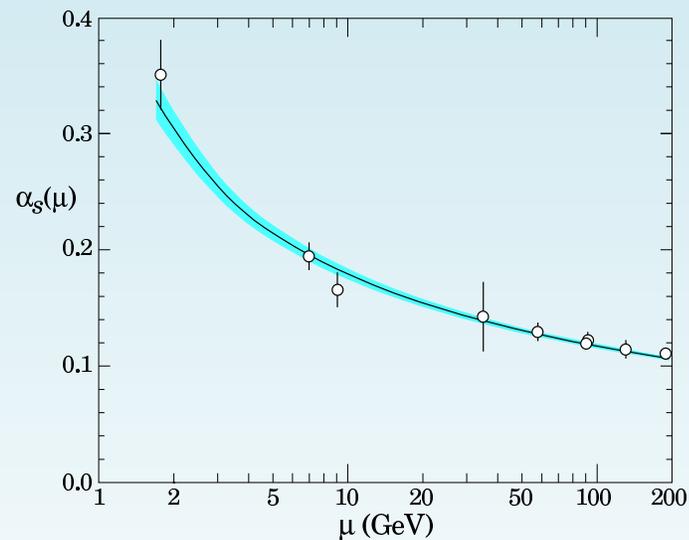
$m_e, \alpha \approx 1/137$



# Como fazer as contas?

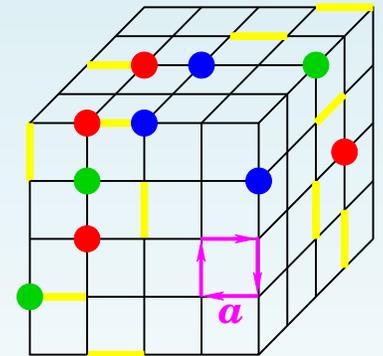
---

A intensidade da interação  $\alpha_s$  torna-se maior para  $r$  grande ( $p$  pequeno) e vice-versa (**liberdade assintótica**).  
A **teoria de perturbação** apresenta problemas no limite de baixas energias.



# QCD na rede

- K. Wilson (1974); demonstrou **confinamento** no limite de acoplamento forte
- Quantização usando **integrais de trajetória**  $\implies$  soma sobre as configurações com peso  $e^{iS/\hbar}$
- **Formulação Euclidiana** (continuação analítica para variável temporal imaginária)  $\implies$  peso  $e^{-S/\hbar}$
- Introdução da **rede discreta para o espaço-tempo**  $\implies$  corte para **grandes momentos**  $1/a$  (ultra-violeta)  $\implies$  regularização da teoria
- Redes de **tamanho finito**  $\implies$  corte para **pequenos momentos**  $1/L$  (infra-vermelho)



# QCD vira Modelo de Moléculas!

---

O procedimento acima transforma uma **teoria quântica de campos** em um **modelo de mecânica estatística**, que pode ser estudado por **simulação numérica** com métodos de Monte Carlo.

- 
- O **que é** a Simulação Computacional?

---

- O **que é** a Simulação Computacional?

- ⇒ Experimento Virtual (Teórico!)

- 
- O **que é** a Simulação Computacional?  
⇒ Experimento Virtual (Teórico!)
  - E **para que** serve?

---

- O **que é** a Simulação Computacional?

- ⇒ Experimento Virtual (Teórico!)

- E **para que** serve?

- ⇒ Importância para **pesquisa aplicada**

---

- O **que é** a Simulação Computacional?

- ⇒ Experimento Virtual (Teórico!)

- E **para que** serve?

- ⇒ Importância para **pesquisa aplicada**

- ⇒ **Modelagem** de sistemas

---

- O **que é** a Simulação Computacional?

- ⇒ Experimento Virtual (Teórico!)

- E **para que** serve?

- ⇒ Importância para **pesquisa aplicada**

- ⇒ **Modelagem** de sistemas

- ⇒ Crucial para o entendimento das **interações entre quarks!**

# Evolução Temporal (Dinâmica)

---

É o que **caracteriza** uma simulação.

Sistema **evolui** no tempo, tem **vida própria!**

Realizamos **medidas**, analisamos **dados**

# Evolução Temporal (Dinâmica)

---

É o que **caracteriza** uma simulação.

Sistema **evolui** no tempo, tem **vida própria!**

Realizamos **medidas**, analisamos **dados**

Regra de evolução (dinâmica) pode ser **clássica** ou mesmo **quântica**. Sistema real, com dinâmica conhecida, em **condições fictícias** (exemplos: dinâmica molecular, Gedankenexperiment)

# Evolução Temporal (Dinâmica)

---

É o que **caracteriza** uma simulação.

Sistema **evolui** no tempo, tem **vida própria!**

Realizamos **medidas**, analisamos **dados**

Regra de evolução (dinâmica) pode ser **clássica** ou mesmo **quântica**. Sistema real, com dinâmica conhecida, em **condições fictícias** (exemplos: dinâmica molecular, Gedankenexperiment)

Casos em que não há formulação física: **Sistema fictício**  
⇒ modelagem (**in silico**)

# Evolução Temporal (Dinâmica)

---

É o que **caracteriza** uma simulação.

Sistema **evolui** no tempo, tem **vida própria!**

Realizamos **medidas**, analisamos **dados**

Regra de evolução (dinâmica) pode ser **clássica** ou mesmo **quântica**. Sistema real, com dinâmica conhecida, em **condições fictícias** (exemplos: dinâmica molecular, Gedankenexperiment)

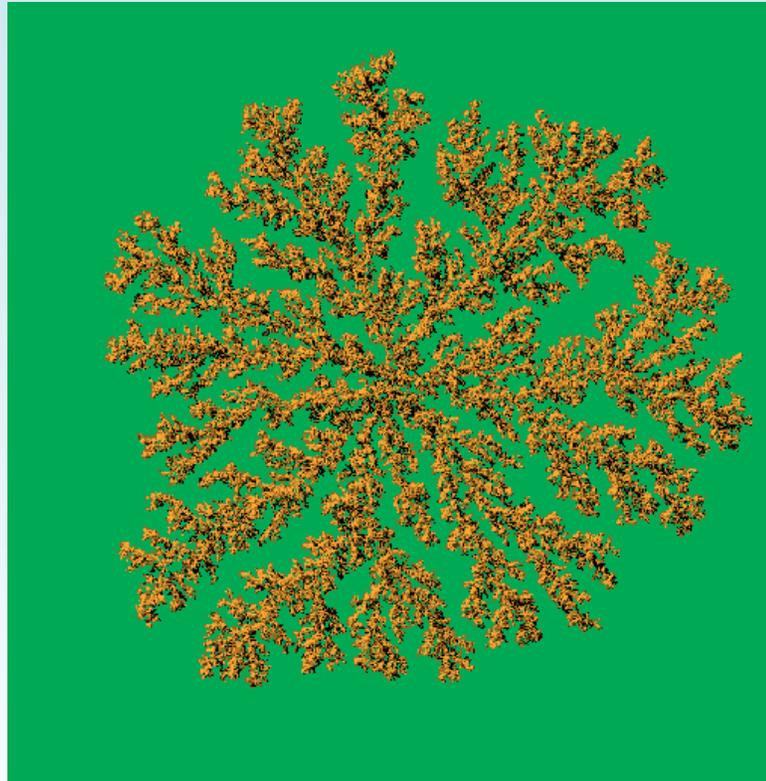
Casos em que não há formulação física: **Sistema fictício**  
⇒ modelagem (**in silico**)

**Ou:** sistema real, **dinâmica fictícia** (truque!)

# Autômato Celular

---

**Células** assumem valores finitos a cada instante de tempo.  
Regras **locais** de transição  $\Rightarrow$  comportamento **emergente**,  
solução numérica de equações diferenciais, geração de padrões  
visuais interessantes, e.g. **agregação limitada por difusão**



# O Jogo da Vida

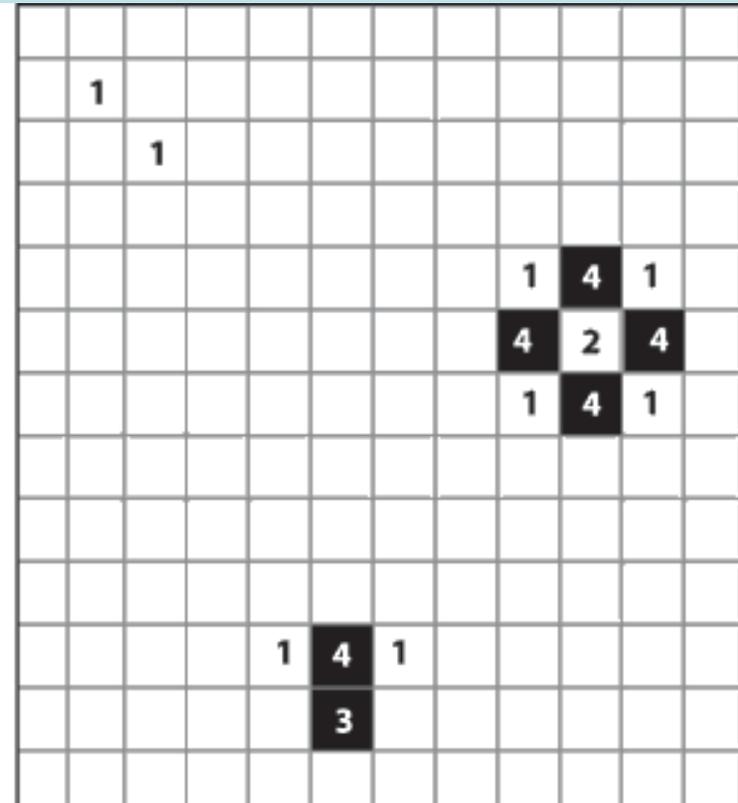
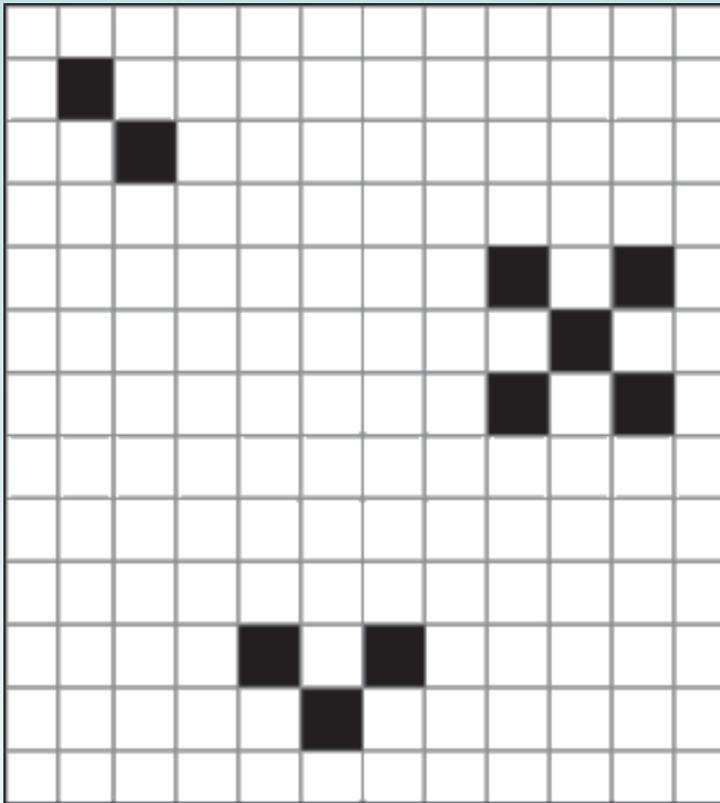
---

Autômatos **determinísticos**, com regras simples, ilustram o comportamento de diversos sistemas físicos (e.g. autômatos unidimensionais de Wolfram)

⇒ **Jogo da Vida**, proposto em 1970 por J. Conway, pode modelar a dinâmica populacional de formas simples de vida (e.g. colônias de **bactérias**).

Tabuleiro de células, com as regras:

- células com menos de 2 ou mais de 3 vizinhos **morrem**
- células com 2 ou 3 vizinhos vivos **sobrevivem**
- indivíduos **nascem** em células vazias com 3 vizinhos



<http://www.kyphilom.com/www/java/life/life.html>

# Método de Monte Carlo

---

Sistemas estocásticos são simulados no computador usando um **gerador de números aleatórios**



⇒ tratamento teórico, com aspectos experimentais:

- dados, erros
- “medidas” no tempo



# Gerador de Números Aleatórios

---

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

John Von Neumann (1951)

**gerador** = **prescrição algébrica** que produz sequência de números  $r_i$  com distribuição desejada (em geral **uniforme em  $[0,1]$** ) dada uma **semente**.

**Nota:** esta sequência é **determinística**, a operação repetida a partir do mesmo ponto inicial gera a mesma sequência  $\Rightarrow$  números **pseudo-aleatórios**.

# Exemplo: rand()

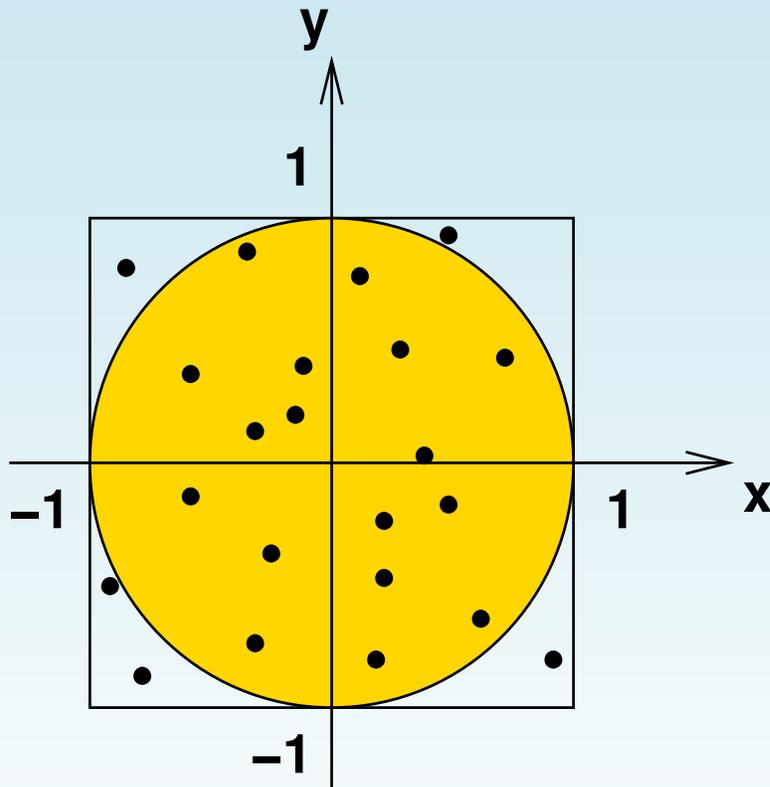
---

```
! inicializacao  
iseed = 2011  
call srand(iseed)  
!  
! numero aleatorio  
r = rand()
```

- semente: número inteiro
- a cada passo um novo inteiro é produzido e usado como semente para o passo sucessivo
- inteiros são convertidos em reais em  $[0,1]$
- número aleatório em  $[a,b]$ :  $a + \text{rand}() * (b-a)$

# Área do Círculo de Raio 1

Lançando  $N$  pontos aleatórios uniformemente no quadrado:  $x \in [-1, 1]$ ,  $y \in [-1, 1]$



razão entre as áreas

$$\frac{A_{\circ}}{A_{\square}} = \frac{\pi}{4} = \frac{n}{N}$$

$n < N$  é o número de pontos no círculo

# Integral Unidimensional

---

**Integral** como soma de variáveis aleatórias igualmente distribuídas

$$I = \int_0^1 f(x) dx \rightarrow \frac{\sum_i f(x_i)}{N}$$

com  $x_i$  uniformemente distribuídos em  $[0,1]$ .

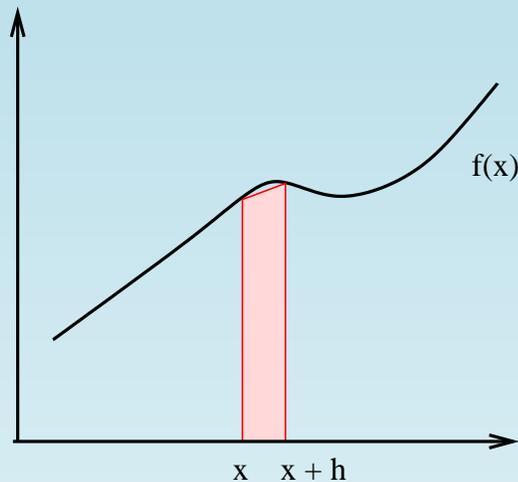
Na verdade, para  $N$  finito  $\bar{I} \equiv \frac{\sum_i f(x_i)}{N}$

é uma **variável aleatória**, que converge para seu valor médio  $I$  com erro proporcional a  $1/\sqrt{N}$  (teorema central do limite).

$$\sigma_{\bar{I}}^2 = \frac{\sigma_f^2}{N} = \frac{\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2}{N}$$

**Exercício:** derive a expressão acima

# Métodos Determinísticos



**Regra do trapezóide:** estima a área compreendida entre  $x$  e  $x+h$  como a área do trapezóide definido pela aproximação linear da função entre estes dois pontos.

$$\int_x^{x+h} f(x') dx' = \frac{h}{2} [f(x) + f(x+h)] + \mathcal{O}(h^3 f'')$$

erro para integral em  $[a, b]$  é  $\mathcal{O}(h^2) \sim N^{-2}$

**Regra de Simpson:** aproximação de 3 pontos para  $f(x) \Rightarrow$   
erro é  $\sim N^{-4}$

# Comparação

---

- $d = 1$ :

métodos determinísticos tipicamente têm erros  $\mathcal{O}(N^{-2})$  (regra do trapézio) ou  $\sim \mathcal{O}(N^{-4})$  (regra de Simpson); **Monte Carlo** tem  $\mathcal{O}(N^{-1/2})$ : com  $2N$  pontos o erro diminui por um **fator 4** (trapezóide), **16** (Simpson) ou  $\sqrt{2}$  (Monte Carlo)

- $d > 1$ :

para integral  $d$ -dimensional  $N \sim 1/h^d \Rightarrow$  erro  $N^{-2/d}$  (trapezóide) ou  $N^{-4/d}$  (Simpson)  $\Rightarrow$  **Monte Carlo** começa a ser vantagem a partir de  $d = 8...$

# O Problema da Mecânica Estatística

---

**Mecânica Estatística:** probabilidade de uma configuração  $S$  para um sistema em equilíbrio à temperatura  $T$  é dada (no ensemble canônico) em termos de sua hamiltoniana  $\mathcal{H}(S)$  pela distribuição de Boltzmann

$$P(S) = \frac{e^{-\beta\mathcal{H}(S)}}{Z}; \quad Z = \int dS e^{-\beta\mathcal{H}(S)}; \quad \beta = 1/KT$$

Média termodinâmica do observável  $A$  dada por

$$\langle A \rangle = \int dS A(S) P(S)$$

e.g. energia:  $E = \langle \mathcal{H}(S) \rangle$

Integral (multi-dimensional) muito complicada!

# Estimativa

---

Tipicamente, em mecânica estatística o número de dimensões (i.e. número de graus de liberdade) é  $d \sim 10^3$  (e.g. modelo de Ising em 3d com 10 pontos por direção)

⇒ tempo para somar  $2^{1000}$  termos em computador de 1 Tflops:

# Estimativa

---

Tipicamente, em mecânica estatística o número de dimensões (i.e. número de graus de liberdade) é  $d \sim 10^3$  (e.g. modelo de Ising em 3d com 10 pontos por direção)

⇒ tempo para somar  $2^{1000}$  termos em computador de 1 Tflops:

$$t = 10^{288} s = 10^{270} \times \text{idade do universo}$$

# Estimativa

---

Tipicamente, em mecânica estatística o **número de dimensões** (i.e. número de **graus de liberdade**) é  $d \sim 10^3$  (e.g. modelo de Ising em 3d com 10 pontos por direção)

⇒ tempo para somar  $2^{1000}$  termos em computador de 1 Tflops:

$$t = 10^{288} s = 10^{270} \times \text{idade do universo}$$

⇒ **Monte Carlo não é a melhor escolha,  
é a única escolha!**

# Amostragem da Distribuição de Boltzmann

---

Mesmo com bons métodos e amostragem por importância, para uma distribuição conjunta de muitos graus de liberdade como a distribuição de Boltzmann

$$\langle A \rangle = \int A(x) w(x) dx, \quad w(x) = \frac{e^{-\beta \mathcal{H}(x)}}{Z}$$

não há esperança de amostragem direta!

**Solução:** Monte Carlo dinâmico. **Inventamos** uma evolução temporal de modo que as configurações geradas sejam distribuídas de acordo com  $w(x)$ . Isto pode ser feito para uma **dinâmica markoviana** escolhida de forma conveniente.

# Método de Metropolis

---

based on proposing and accepting/rejecting a step  $x \rightarrow y$

- accept if  $w(y)/w(x) \geq 1$
- otherwise accept with probability  $w(y)/w(x)$

the probability of acceptance is  $A_{xy} = \min \{1, w(y)/w(x)\}$ . Then consider the transition matrix  $p_{xy} = T_{xy} A_{xy}$  (with general  $T_{xy} = T_{yx}$ )

**Exercise:** show that the above choice satisfies detailed balance

For the Boltzmann distribution this means

$$w(x) = \frac{e^{-\beta E(x)}}{Z} \Rightarrow \frac{w(y)}{w(x)} = e^{-\beta \Delta E}; \quad \Delta E \equiv E(y) - E(x)$$

$\Rightarrow$  accept if  $\Delta E \leq 0$ ; otherwise accept with probability  $e^{-\beta \Delta E}$

**Note:** if proposed step is rejected, keep old value and move to a new site; when possible, choose  $T_{xy}$  such that acceptance is 50%

# Monte Carlo Method: Summary

---

Integral becomes sum of random variables

$$\int f(x) d\mu, \quad d\mu = \frac{e^{-\beta\mathcal{H}(x)}}{Z} dx \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i)$$

where  $x_i$  have statistical distribution  $\mu$

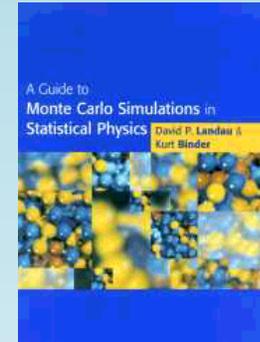
- **Static** Monte Carlo: independent sampling (error  $\sim 1/\sqrt{N}$ )
- **Dynamic** Monte Carlo: Simulation of a Markov chain with **equilibrium distribution**  $\mu$  (error  $\sim \sqrt{\tau/N}$ ). Autocorrelation time  $\tau$  related to **critical slowing-down**. **Note:** similar to **experimental methods**, **but** temporal dynamics was artificially introduced

**Errors:** either consider only effectively independent samples (via temporal correlation analysis) and error is given by standard deviation, **jack-knife**, **bootstrap** or consider all samples and error is estimated taking correlations into account: **binning** method, self-consistent windowing method

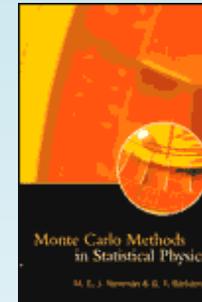
# Referências

---

- A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics, [Landau & Binder](#) (Cambridge, 2000)



- Monte Carlo Methods in Statistical Physics, [Newman & Barkema](#) (Oxford, 1999)

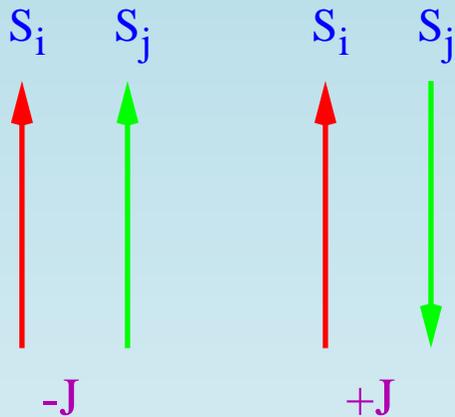


- Monte Carlo Methods in Statistical Mechanics: Foundations and New Algorithms, [Sokal](#) (1996),

<http://citeseer.nj.nec.com/sokal96monte.html>

- Notas de aula - Transição de fase e fenômenos críticos (2002), <http://lattice.if.sc.usp.br/>

# Exemplo: o Modelo de Ising

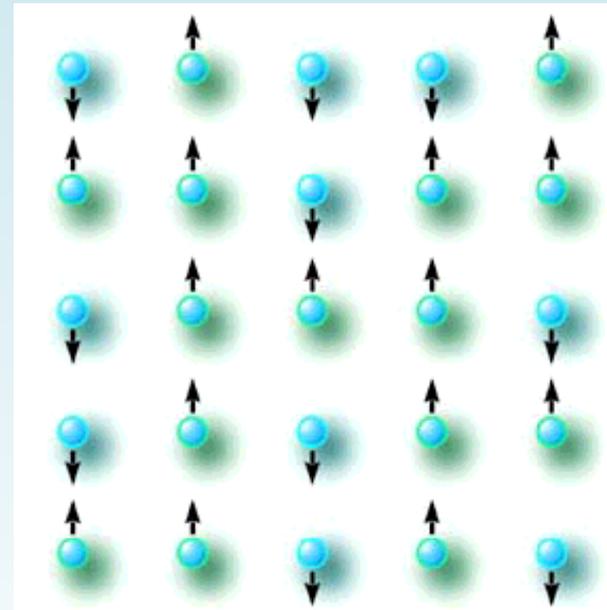


spins de dois estados, que preferem ficar alinhados

$$\mathcal{H}(S) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i$$

Observáveis de interesse

- Energy:  $E = \langle \mathcal{H}(S) \rangle$
- Specific Heat:  $C_V = \partial E / \partial T$
- Magnetization:  $M = \langle \sum_i S_i \rangle$
- Suscetibility:  $\chi = \partial M / \partial H$



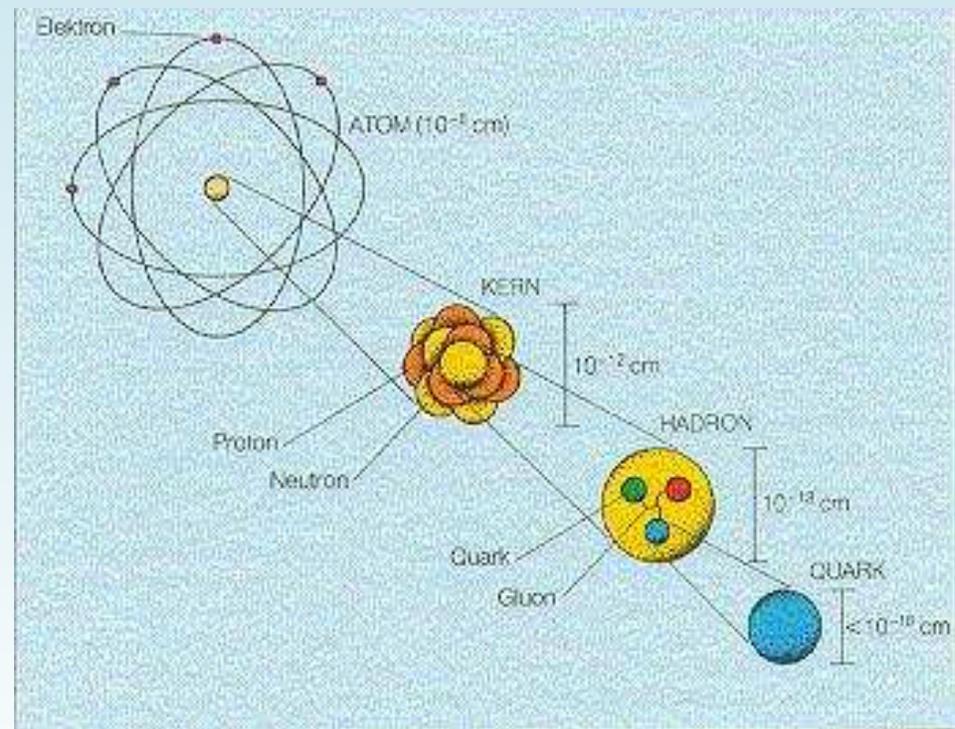
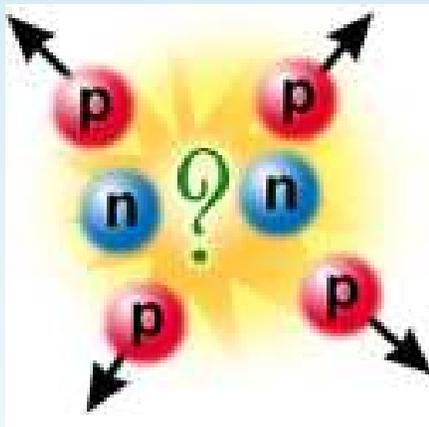
<http://www.inference.phy.cam.ac.uk/mackay/itprnn/ising/>

# Aplicações do Método de Monte Carlo

---

- **Mecânica Estatística**: descrição de **sistemas de muitos corpos** ( $\approx 10^{23}$  corpos...) utilizando grandezas médias  $\Rightarrow$  comportamento **macroscópico** (termodinâmica) a partir da descrição **microscópica** de sistemas como fluidos/gases, modelos de **materiais magnéticos**, sistemas biológicos; tratamento de **fenômenos críticos**, sistemas complexos.
- **Matéria Condensada**: descrição aproximada de sistemas quânticos, polímeros, fluidos complexos, propriedades condutoras/magnéticas.

- **Cromodinâmica Quântica (QCD):** teoria quântica de campos que descreve a **força nuclear** como interação forte entre **quarks** e **glúons**; Formulação de **Rede**  $\Leftrightarrow$  Mecânica Estatística.



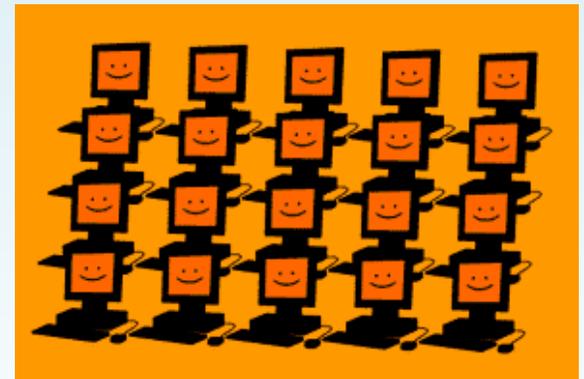
# Simulações de QCD na rede

---

- Consideremos uma partícula de massa  $m = m_{rede}/a$ .
- No limite do contínuo ( $a \rightarrow 0$ )  $\implies m_{rede} \rightarrow 0$ .
- No mesmo limite o comprimento de correlação  $\xi_{rede} = 1/m_{rede} \rightarrow \infty$ .
- O limite do contínuo corresponde ao ponto crítico da teoria de rede.

## Métodos de Monte Carlo:

simulações sem quarks (quenched QCD) e com quarks (full QCD  $\sim$  100 vezes mais pesadas)  $\implies$  super-computadores.



# Quark Bound States from Lattice QCD

The **recipe** for lattice simulations:

1) Evolve gluon fields (**link variables**) in the **Monte Carlo** dynamics associated with the partition function

$$Z = \int \mathcal{D}U e^{-S_g} \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\bar{\psi} e^{-\int d^4x \bar{\psi}(x) K \psi(x)} = \int \mathcal{D}U e^{-S_g} \det K(U)$$

(the **quenched approximation** corresponds to  $\det K = 1$ )

2) Obtain quark propagators from  $\langle \psi \bar{\psi} \rangle = \langle K^{-1} \rangle$

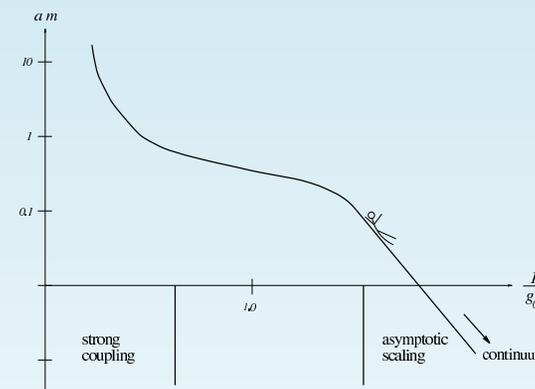
3) Use the quark fields to build (Euclidean) correlators for the desired bound states  $C(t) = \langle O(t) O(0) \rangle$ , where  $O(t) = \bar{\psi} \Gamma \psi$  and  $\Gamma$  is the appropriate Dirac matrix (e.g.  $\Gamma = \gamma_5$  for pseudoscalar mesons)

4) Extract masses, etc from  $C(t) \rightarrow \sum_n |\langle 0|O|n \rangle|^2 e^{-E_n t}$   
 $\Rightarrow$  at large  $t$   $m_{eff}(t) = \log[C(t)/C(t+1)]$  approaches a plateau

5) Translate results into physical units:  $m = m_{latt}/a$

# De volta ao espaço contínuo

- Limite termodinâmico (volume  $V = N^d$  infinito).
- Limite do contínuo ( $a \rightarrow 0$ ).
  - $N \rightarrow \infty$  para ter  $L = aN$  (medido em fm) fixo e  $N > \xi_{rede}$  ;
  - grupo de renor.  $\implies \log(\xi_{rede}) \sim 1/g_0^2 \sim \beta$ ; isso implica  $g_0 \rightarrow 0$ ,  $\beta \rightarrow \infty$  e  $\xi_{rede} \sim e^\beta$  (lei de escala assintótica), i.e.  $\xi = 1/m \sim a e^\beta$  ;
  - elimina  $e^\beta$  calculando razão de duas massas (lei de escala) ou fixa o espaçamento de rede  $a$  usando um input experimental (renormalização).
- Limite quiral ( $m_q$  pequenas).



# Partículas na rede

---

O comprimento de onda de Compton de uma partícula é dado por

$$\lambda = \frac{h}{m c} = \frac{1.2 \text{ GeV fm}}{m (\text{GeV})}$$

Para estudar uma partícula usando o formalismo de rede devem ser satisfeitas as **desigualdades**

$$a \ll \lambda \ll L = N a$$



# Partículas na rede

O comprimento de onda de Compton de uma partícula é dado por

$$\lambda = \frac{h}{m c} = \frac{1.2 \text{ GeV fm}}{m (\text{GeV})}$$

Para estudar uma partícula usando o formalismo de rede devem ser satisfeitas as desigualdades

$$a \ll \lambda \ll L = N a$$



**Exemplo: estudo do pión e do quark  $b$**

$$m_{\pi} \approx 140 \text{ MeV} \longrightarrow \lambda_{\pi} \approx 8.5 \text{ fm}$$

$$m_b \approx 5 \text{ GeV} \longrightarrow \lambda_b \approx 0.24 \text{ fm}$$

$$a \ll \lambda_b \ll \lambda_{\pi} \ll N a$$

$\implies$

$$a \approx 0.06 \text{ fm} \quad \text{e} \quad L \approx 34 \text{ fm}$$

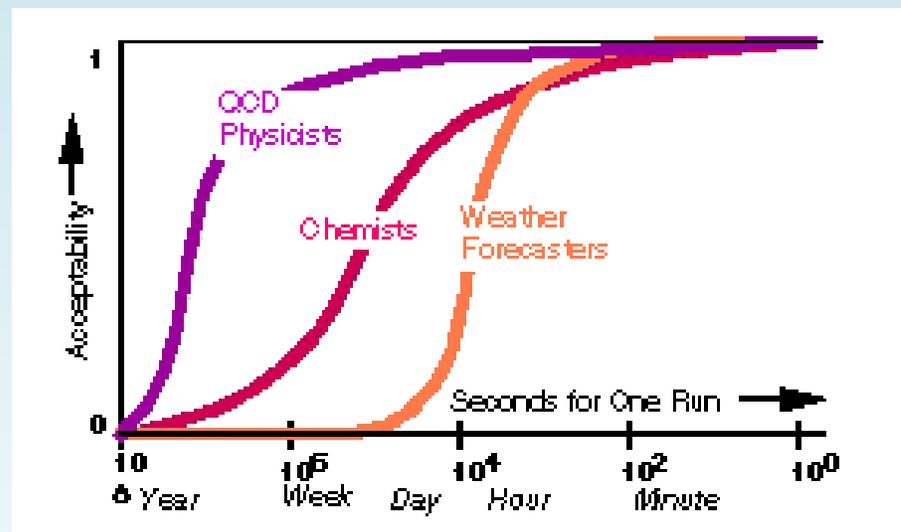
**Redes de tamanho  $\sim 560^4$  !**



# Problemas-Desafio da Supercomputação

Estudo do Scalable Computing Laboratory, Universidade do Estado do Iowa (2001): “A Paradigm For Grand Challenge Performance Evaluation”

**Aceitabilidade** de tempo de simulação por cultura científica



*“QCD physicists have an extraordinary tolerance for execution times that take a significant fraction of a human lifetime”*

# Super-computadores para o estudo da QCD

---

Século passado: **APE100** (100 Gflops, Europa);  
**QCDSP** (400–600 Gflops, EUA); **CP-PACS** (600  
Gflops, Japão); **APEmille** ( $\sim 1$  Tflops, Europa)



# Super-computadores para o estudo da QCD

---

Século passado: **APE100** (100 Gflops, Europa);  
**QCDSP** (400–600 Gflops, EUA); **CP-PACS** (600  
Gflops, Japão); **APEmille** ( $\sim 1$  Tflops, Europa)



Novos supercomp. dedicados dos anos 2000  
( $\sim 10$  Tflops): **QCDOC** (EUA), **apeNEXT** (Europa);  
No Japão: (parte do) **Earth Simulator** (40 Tflops);  
SciDAC, EUA estabelece **requisitos** de cerca de  
**40 Teraflops** para resolver a QCD

# Super-computadores para o estudo da QCD

Século passado: **APE100** (100 Gflops, Europa);  
**QCDSP** (400–600 Gflops, EUA); **CP-PACS** (600  
Gflops, Japão); **APEmille** ( $\sim 1$  Tflops, Europa)



Novos supercomp. dedicados dos anos 2000  
( $\sim 10$  Tflops): **QCDOC** (EUA), **apeNEXT** (Europa);  
No Japão: (parte do) **Earth Simulator** (40 Tflops);  
SciDAC, EUA estabelece **requisitos** de cerca de  
**40 Teraflops** para resolver a QCD

Clusters de PC atuais (milhares de nós): **Blue Gene/L**  
(**IBM**) no Lawrence Livermore National Laboratory na  
Califórnia, EUA (478 Tflops); **Blue Gene/P** (**IBM**) em  
Jülich, Alemanha (167 Tflops)



# Super-computadores para o estudo da QCD

Século passado: **APE100** (100 Gflops, Europa);  
**QCDSP** (400–600 Gflops, EUA); **CP-PACS** (600  
Gflops, Japão); **APEmille** ( $\sim 1$  Tflops, Europa)



Novos supercomp. dedicados dos anos 2000  
( $\sim 10$  Tflops): **QCDOC** (EUA), **apeNEXT** (Europa);  
No Japão: (parte do) **Earth Simulator** (40 Tflops);  
SciDAC, EUA estabelece requisitos de cerca de  
**40 Teraflops** para resolver a QCD

Clusters de PC atuais (milhares de nós): **Blue Gene/L**  
(**IBM**) no Lawrence Livermore National Laboratory na  
Califórnia, EUA (478 Tflops); **Blue Gene/P** (**IBM**) em  
Jülich, Alemanha (167 Tflops)

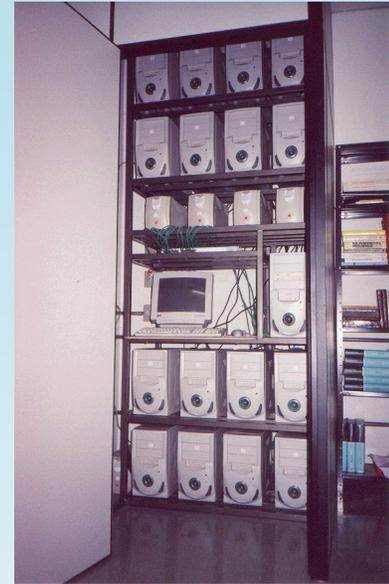


Projeto **QPACE** (Universidades Europeias + IBM): supercomputador  
paralelo para QCD na rede, escalável, processadores PowerXCell 8i.

# Recursos Locais

IFSC–USP: **21+23+29 Gflops** (peak), 4+8+12 GB de memória

- **Cluster 1**: 16 nós e 1 servidor com **866MHz Pentium III** e 256/512 MB RAM (133 MHz), 4 nós com **1.7GHz Pentium IV** e 256 MB RAM (266 MHz), rede full duplex de **100 Mbps**
- **Cluster 2**: 4 nós **2.8GHz Pentium IV** e 1 GB RAM (400 MHz), 4 nós **3.0GHz Pentium IV** e 1 GB RAM (400 MHz), duas redes full duplex de **100 Mbps**
- **Cluster 3**: 8 nós **3.6GHz Pentium IV** e 1.5 GB RAM (400 MHz), redes full duplex de **1 Gbps**



**Supercomputador IBM** na **USP**: 112 blades com 2 CPU's dual-core PowerPC 970 de 2.5GHz, rede Myrinet, cerca de **4.5 Tflops peak**, **posição 363** no *TOP500* (Novembro de 2006)

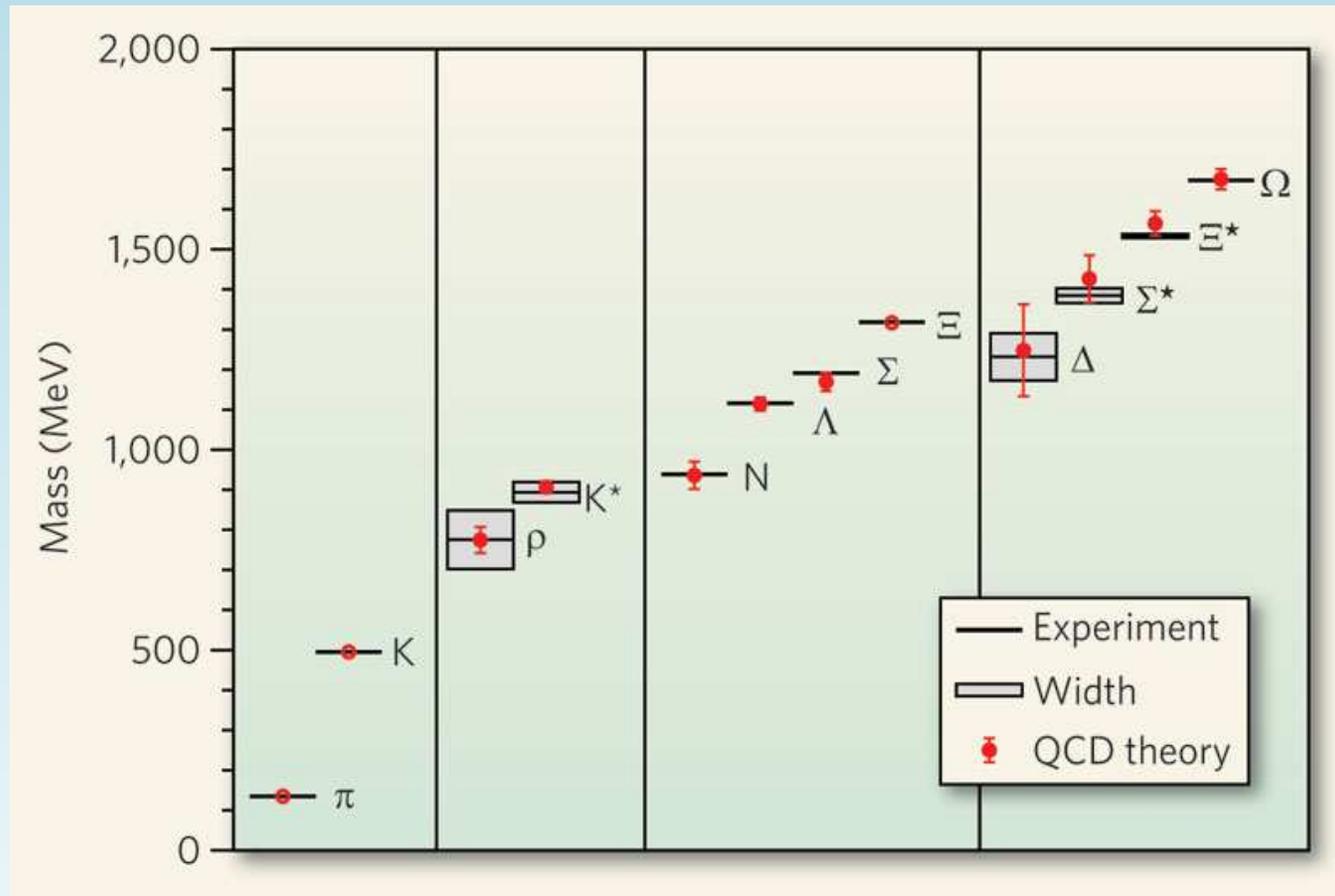
# Mais recentemente: GHOST-FACTORY

---

- 1 master + 8 nós, cada um com 2 CPU Intel Xeon 2.40GHz (quadcore, 8 MB cache) e 24 GB de memória
- total de 72 ( $\times 2$ ) cores e 216 GB de memória
- 8 placas NVIDIA Tesla S1070 Série 500, 960 cores e 16 GB de memória, 346 Gflops de *peak performance* (trabalhando em precisão dupla) e 4.147 Tflops (em precisão simples)
- infiniband 16 Gbits/s, total de 6 Tbytes HD



# Resultados da QCD na rede: espectro

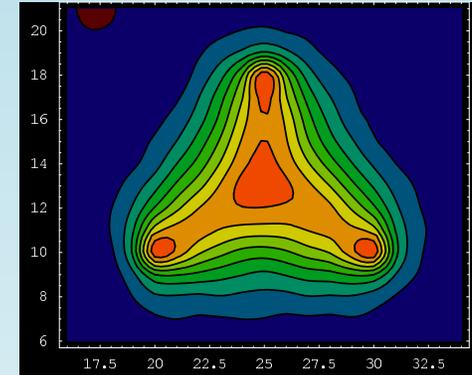
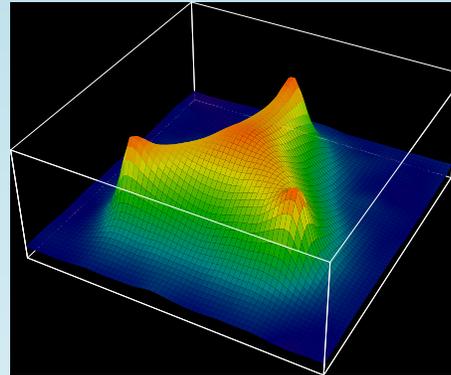
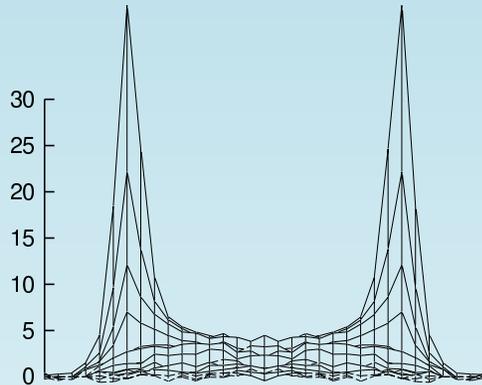


Massas dos hádrons leves obtidas por [S. Dürr et al. \(Science, 2008\)](#) vs. valores experimentais. **Note:**  $\pi$ ,  $K$ ,  $\Xi$  como inputs.

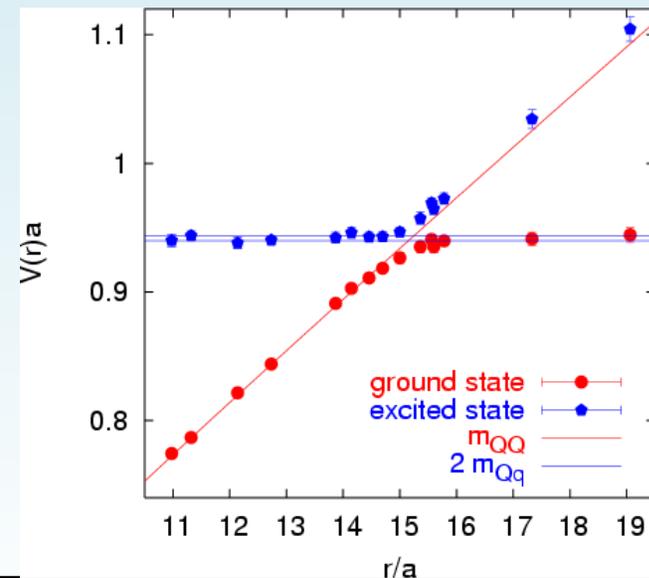
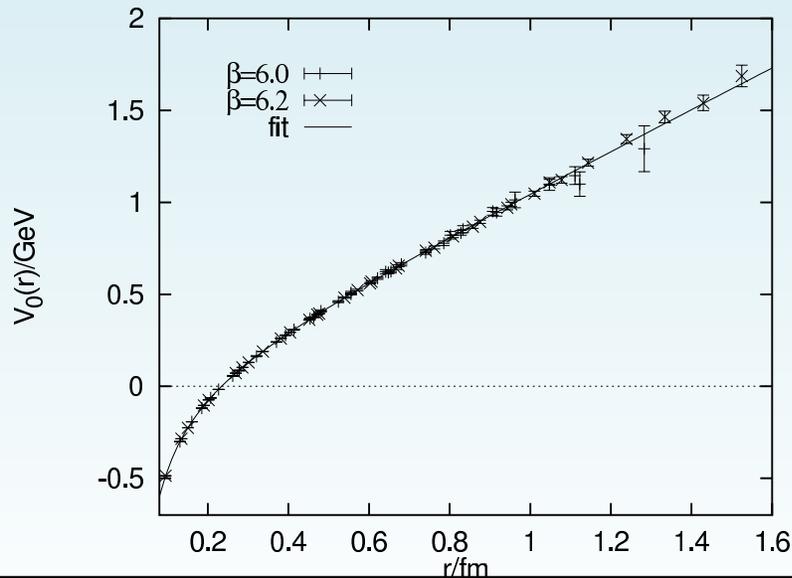
**Repercussão:** (Novembro 2008): United Press, Scientific American, Nature (F. Wilczek)

# QCD na rede: confinamento

Pode-se observar a formação de **tubos de fluxo**

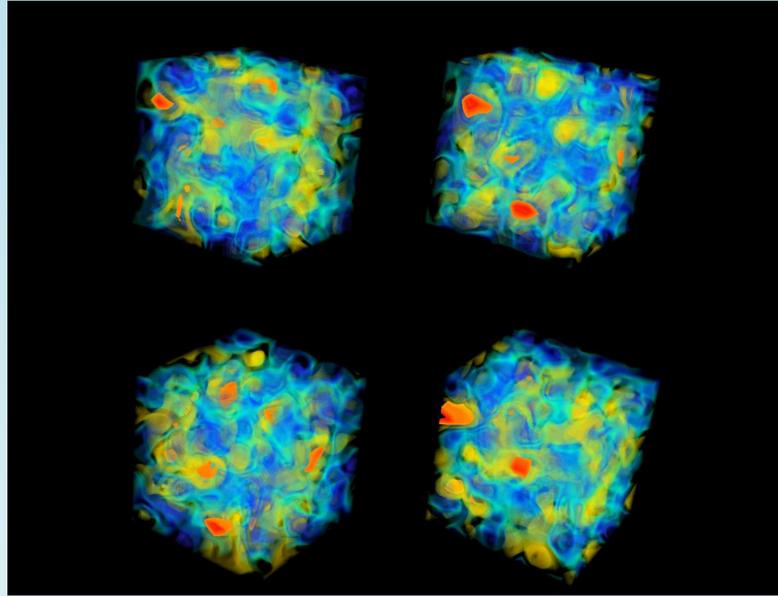


**Crescimento linear** do potencial entre quarks, **quebra da corda**



# Visualização

---



Quatro “fatias” (tridimensionais) da rede mostrando a carga topológica para o vácuo da QCD

Links:

<http://latticeqcd.org/>

<http://www.physics.adelaide.edu.au/theory/staff/leinweber/VisualQCD/Nobel/>

# Concluindo: a Força Forte

---

- Os quarks estão dentro de nós!

# Concluindo: a Força Forte

---

- Os quarks estão dentro de nós!
- Se a força forte não fosse tão **estranha** teríamos apenas 1% da nossa massa!

# Concluindo: a Força Forte

---

- Os quarks estão dentro de nós!
- Se a força forte não fosse tão **estranha** teríamos apenas 1% da nossa massa!
- A **QCD na rede** possibilita “insights” importantes sobre o comportamento da força forte

# Concluindo: a Força Forte

---

- Os quarks estão dentro de nós!
- Se a força forte não fosse tão **estranha** teríamos apenas 1% da nossa massa!
- A **QCD na rede** possibilita “insights” importantes sobre o comportamento da força forte
- Espectro hadrônico preciso obtido a partir da teoria (**ab initio**)

# Concluindo: a Força Forte

---

- Os quarks estão dentro de nós!
- Se a força forte não fosse tão **estranha** teríamos apenas 1% da nossa massa!
- A **QCD na rede** possibilita “insights” importantes sobre o comportamento da força forte
- Espectro hadrônico preciso obtido a partir da teoria (**ab initio**)
- Não somos apenas **poeira de estrelas**, somos principalmente **glúons virtuais** (flutuações do vácuo)!

# Concluindo: a Força Forte

---

- Os quarks estão dentro de nós!
- Se a força forte não fosse tão **estranha** teríamos apenas 1% da nossa massa!
- A **QCD na rede** possibilita “insights” importantes sobre o comportamento da força forte
- Espectro hadrônico preciso obtido a partir da teoria (**ab initio**)
- Não somos apenas **poeira de estrelas**, somos principalmente **glúons virtuais** (flutuações do vácuo)!
- Falta muito a ser feito (confinamento...)

# A QCD na Rede e o LHC

---

- **energia suficiente** para encontrar o **bóson de Higgs**, partículas super-simétricas, etc. (**Atlas**, CMS)
- estudo da **B physics** (LHCb): **desequilíbrio entre matéria e anti-matéria no universo** (violação da simetria CP, medida dos elementos da matriz CKM)
- colisão de íons pesados (Alice): re-criação das condições do universo primordial (**little bang**), estudo do **plasma de quarks e glúons**

Resultados de **QCD na rede** serão cruciais para testar os **limites** do Modelo Padrão, ou seja, os limites da nossa capacidade de descrever o universo. Este estudo depende fortemente de **interfaces** entre a física de altas energias e duas outras áreas da ciência: mecânica estatística e ciência da computação.

# Conclusão

---

- Das bactérias aos quarks (ou vice-versa?) a simulação computacional é uma **ferramenta indispensável**

# Conclusão

---

- Das bactérias aos quarks (ou vice-versa?) a simulação computacional é uma **ferramenta indispensável**
- Simulações de QCD na rede atingiram a maturidade, com cálculos precisos do **espectro hadrônico** e **visualização do confinamento**

# Conclusão

---

- Das bactérias aos quarks (ou vice-versa?) a simulação computacional é uma **ferramenta indispensável**
- Simulações de QCD na rede atingiram a maturidade, com cálculos precisos do **espectro hadrônico** e **visualização do confinamento**
- Ainda falta muito... Podemos **ver** o confinamento, mas saberemos **explicá-lo?** (problemas do milênio)

# Conclusão

---

- Das bactérias aos quarks (ou vice-versa?) a simulação computacional é uma **ferramenta indispensável**
- Simulações de QCD na rede atingiram a maturidade, com cálculos precisos do **espectro hadrônico** e **visualização do confinamento**
- Ainda falta muito... Podemos **ver** o confinamento, mas saberemos **explicá-lo?** (problemas do milênio)
- Simulações numéricas são essenciais para a determinação dos **limites do Modelo Padrão** (e.g. através de inputs de QCD para cálculo da **matriz CKM**)

# Conclusão

---

- Das bactérias aos quarks (ou vice-versa?) a simulação computacional é uma **ferramenta indispensável**
- Simulações de QCD na rede atingiram a maturidade, com cálculos precisos do **espectro hadrônico** e **visualização do confinamento**
- Ainda falta muito... Podemos **ver** o confinamento, mas saberemos **explicá-lo?** (problemas do milênio)
- Simulações numéricas são essenciais para a determinação dos **limites do Modelo Padrão** (e.g. através de inputs de QCD para cálculo da **matriz CKM**)
- **Método geral**, com possíveis aplicações à física além do Modelo Padrão