Propagadores e Estruturas Simpléticas

Sandro Vitenti

Introdução

Objetivos da Aula

Nesta aula, exploramos as estruturas matemáticas por trás dos propagadores dependentes e independentes do tempo. Os principais tópicos abordados foram:

- **Soluções da equação de Helmholtz** e a importância dos sinais na separação de variáveis
- **O formalismo de sistemas dinâmicos** e a propagação de distribuições de probabilidade
- **O Wronskiano** como ferramenta para estudar independência linear de soluções
- **A estrutura simplética** das equações diferenciais de segunda ordem
- **A conexão com a mecânica quântica** e o papel da unidade imaginária

> **Note**
>
> A motivação central é entender como a informação se propaga no espaço-tempo, tanto do passado para o futuro (propagadores causais) quanto do futuro para o passado (propagadores avançados), e como isso se relaciona com a mecânica quântica e estatística.

Soluções da Equação de Helmholtz

A Equação de Helmholtz e a Separação de Variáveis

A equação de Helmholtz aparece naturalmente quando aplicamos o método de separação de variáveis à equação de onda:

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2} - \nabla^2\phi = 0$$

Com a separação $\phi(t, \mathbf{x}) = h(t)\psi(\mathbf{x})$, obtemos:

$$\frac{1}{h}\frac{d^2 h}{dt^2} = -k^2c^2$$

e

$$\nabla^2\psi = -k^2\psi$$

> **Important**
>
> O sinal negativo em $-k^2$ é crucial: ele garante soluções oscilatórias (senos e cossenos) em vez de exponenciais reais. Este sinal é determinado pelas condições de contorno do problema físico.

A Escolha das Soluções

Para a equação de Helmholtz, as soluções podem ser escritas de várias formas equivalentes:

1. **Forma trigonométrica** (para $k^2 > 0$):

$$\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx)$$

2. **Forma exponencial complexa**:

$$\psi(x) = \alpha e^{ikx} + \alpha^* e^{-ikx}$$

3. **Forma geral** (para β arbitrário):

$$\psi''(x) = \beta\psi(x)$$

> **Tip**
>
> A escolha entre formas trigonométricas e exponenciais não é uma questão de "certo ou errado" — é uma questão de conveniência e de quais condições de contorno precisam ser satisfeitas. As duas representações são equivalentes, assim como escrever um vetor em coordenadas cartesianas ou polares.

O Caso do Laplaciano Tridimensional

Quando resolvemos problemas com simetria esférica, o Laplaciano em coordenadas esféricas nos leva a:

$$\nabla^2\psi = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}$$

Para soluções radiais $\psi(r)$, temos:

$$\frac{d^2\psi}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d\psi}{dr} = -k^2\psi$$

> **Note**
>
> A equação de Helmholtz também aparece na mecânica quântica para partículas livres, onde o operador Hamiltoniano é $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$, e a equação de Schrödinger independente do tempo é $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = E\psi$.

O Propagador de Helmholtz

A Função de Green

Para resolver a equação de Helmholtz com uma fonte pontual, consideramos:

$$(\nabla^2 + k^2)G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -\delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

A solução fundamental (função de Green) é:

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -\frac{e^{ik|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}}{4\pi|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}$$

> **Warning**
>
> O sinal na exponencial (e^{ikr} vs e^{-ikr}) é fundamental para a escolha entre propagadores causais (passado $\rightarrow$ futuro) e avançados (futuro $\rightarrow$ passado). Ambos são igualmente válidos matematicamente, mas têm interpretações físicas diferentes.

Construção da Solução Geral

Para encontrar a solução geral da equação de Helmholtz com uma fonte, usamos o método de separação de variáveis e a função de Green. O resultado é:

$$\psi(\mathbf{x}) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3x' \, G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') f(\mathbf{x}')$$

onde $f(\mathbf{x}')$ é a função fonte.

> Tip
>
> A função de Green representa a resposta do sistema a uma fonte pontual. Para problemas mais complexos, podemos construir soluções por superposição (princípio da linearidade).

Sistemas Dinâmicos e Propagação de Informação

O Problema das Condições Iniciais

Em física clássica, um problema típico consiste em especificar condições iniciais (posição e velocidade) e propagar a solução no tempo. No entanto, há duas motivações para considerar o problema de forma mais geral:

1. **Incerteza experimental**: nunca conhecemos exatamente a condição inicial
2. **Propagação de distribuições**: na mecânica estatística e quântica, propagamos distribuições de probabilidade, não estados exatos

> Important
>
> Na mecânica quântica, o problema é fundamentalmente de condição inicial **e** final, não apenas de condições iniciais. Isso está relacionado ao princípio variacional e aos propagadores de Feynman.

O Wronskiano e a Independência Linear

Para uma equação diferencial de segunda ordem:

$$y'' + P(x)y' + Q(x)y = 0$$

O Wronskiano de duas soluções y_1 e y_2 é definido como:

$$W(y_1, y_2) = y_1 y_2' - y_2 y_1'$$

E satisfaz a equação:

$$W' = -P(x)W$$

Portanto:

$$W(x) = W_0 \exp\left(-\int P(x)dx\right)$$

onde W_0 é uma constante.

> Note
>
> O Wronskiano é uma quantidade conservada (a menos de um fator exponencial) que mede a independência linear das soluções. Se $W \neq 0$, as duas soluções são linearmente independentes e formam uma base para o espaço de soluções.

A Estrutura Simplética

O Espaço de Fase

O espaço de fase é construído a partir das variáveis canônicas (y, p), onde p é o momento conjugado:

$$p = m(x)y'$$

com $m(x)$ sendo a "massa" efetiva do sistema.

As equações de Hamilton para este sistema são:

$$y' = \frac{\partial H}{\partial p}$$

$$p' = -\frac{\partial H}{\partial y}$$

onde a Hamiltoniana é:

$$H(y, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2$$

A Matriz Simplética

O espaço de fase tem uma estrutura simplética natural, representada pela matriz:

$$\Omega = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

Esta matriz satisfaz $\Omega^2 = -I$ e é análoga à unidade imaginária i.

O Wronskiano pode ser escrito como:

$$W = \mathbf{v}_1^T \Omega \mathbf{v}_2$$

onde $\mathbf{v}_i = (y_i, p_i)^T$ são vetores no espaço de fase.

> **!** Important
>
> A estrutura simplética é uma consequência direta do caráter de segunda ordem das equações de movimento. Ela garante a conservação do Wronskiano e, portanto, da independência linear das soluções.

O Papel da Unidade Imaginária

A analogia entre a matriz Ω e a unidade imaginária i é profunda. A matriz Ω atua como um gerador de rotações no espaço de fase:

$$e^{\theta\Omega} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

Na mecânica quântica, a unidade imaginária i aparece como gerador de rotações no espaço de fase (ou espaço de Hilbert), o que está diretamente relacionado à equação de Schrödinger.

> Tip
>
> A escolha de representar soluções complexas ($\psi = \psi_1 + i\psi_2$) em mecânica quântica é equivalente a escolher uma base no espaço de fase. A liberdade de fase $\psi \to e^{i\theta}\psi$ corresponde a rotações no espaço de fase, preservando o Wronskiano (a "norma" do estado).

Conexões com a Mecânica Quântica

A Equação de Schrödinger

A equação de Schrödinger dependente do tempo:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi$$

pode ser vista como uma generalização da estrutura simplética que acabamos de construir. O termo $i\hbar$ garante que a equação preserve a probabilidade (ou seja, a "norma" no espaço de Hilbert), assim como a matriz Ω preserva o Wronskiano.

Propagadores Causal e Avançado

Na teoria quântica de campos, dois tipos de propagadores são fundamentais:

1. **Propagador causal** (ou de Feynman): propaga informação do passado para o futuro
2. **Propagador avançado**: propaga informação do futuro para o passado

Ambos são necessários para descrever corretamente as interações de partículas e antipartículas.

> **Note**
>
> A escolha entre e^{ikr} e e^{-ikr} na função de Green está diretamente relacionada à escolha do propagador (causal ou avançado). Ambas as escolhas são matematicamente válidas e têm interpretações físicas diferentes.

Visualizações com Python

Propagação no Espaço de Fase

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from matplotlib.patches import Ellipse

# Parâmetros
k = 1.0  # constante elástica
m = 1.0  # massa
omega = np.sqrt(k / m)

# Tempo de evolução
t = np.linspace(0, 2 * np.pi / omega, 100)

# Região inicial (elipse)
theta = np.linspace(0, 2 * np.pi, 50)
y0 = 0.5 * np.cos(theta)
p0 = 0.3 * np.sin(theta)

# Evolução no espaço de fase
y = y0 * np.cos(omega * t[:, None]) + (p0 / (m * omega)) * np.sin(omega * t[:, None])
p = -m * omega * y0 * np.sin(omega * t[:, None]) + p0 * np.cos(omega * t[:, None])

# Visualização
fig, ax = plt.subplots(figsize=(8, 8))
```

```python
# Plotar a evolução em diferentes tempos
indices = [0, 25, 50, 75]
colors = ["blue", "green", "orange", "red"]
for i, idx in enumerate(indices):
    ax.plot(y[idx, :], p[idx, :], color=colors[i], label=f"t = {t[idx]:.2f}", alpha=0.7)

    # Área (volume) do espaço de fase
    area = 0.5 * np.pi * np.std(y[idx, :]) * np.std(p[idx, :])
    ax.text(
        y[idx, 0] + 0.3,
        p[idx, 0] - 0.2,
        f"Área = {area:.3f}",
        color=colors[i],
        fontsize=10,
    )

ax.set_xlabel("Posição (y)")
ax.set_ylabel("Momento (p)")
ax.set_title("Evolução de uma região no espaço de fase")
ax.axhline(0, color="black", linestyle="--", alpha=0.3)
ax.axvline(0, color="black", linestyle="--", alpha=0.3)
ax.legend()
ax.grid(True, alpha=0.3)
ax.set_aspect("equal")
plt.show()
```

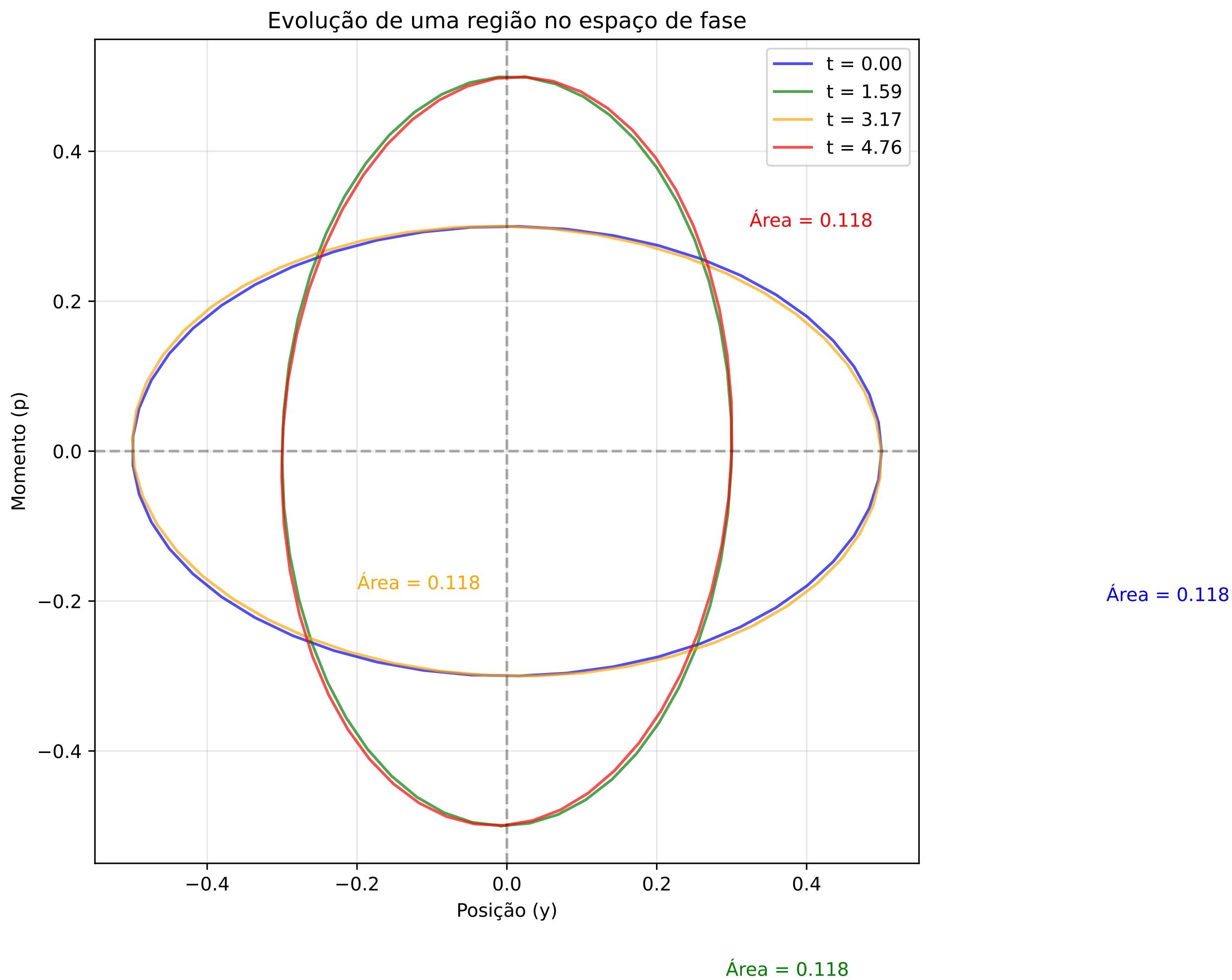

Figure 1: Evolução de uma região no espaço de fase para um oscilador harmônico

A Matriz Simplética como Gerador de Rotações

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

# Matriz simplética
Omega = np.array([[0, 1], [-1, 0]])

# Vetor inicial
v = np.array([1.0, 0.5])

# Ângulos de rotação
theta = np.linspace(0, 2 * np.pi, 100)

# Evolução do vetor
v_rot = []
for t in theta:
    # e^{tΩ} = cos(t)I + sin(t)Ω
    R = np.cos(t) * np.eye(2) + np.sin(t) * Omega
```

```
    v_rot.append(R @ v)
v_rot = np.array(v_rot)

# Visualização
fig, ax = plt.subplots(figsize=(8, 8))

# Trajetória
ax.plot(v_rot[:, 0], v_rot[:, 1], "b-", label="Trajetória", alpha=0.7)

# Pontos específicos
points = [0, np.pi / 4, np.pi / 2, np.pi, 3 * np.pi / 2]
for t in points:
    idx = int(t * len(theta) / (2 * np.pi))
    R = np.cos(t) * np.eye(2) + np.sin(t) * Omega
    vp = R @ v
    ax.plot(vp[0], vp[1], "ro", markersize=8)
    ax.annotate(
        f"  = {t:.2f}",
        (vp[0], vp[1]),
        fontsize=10,
        xytext=(5, 5),
        textcoords="offset points",
    )

# Vetor inicial e final
ax.arrow(
    0,
    0,
    v[0],
    v[1],
    head_width=0.05,
    head_length=0.05,
    fc="green",
    ec="green",
    label="Vetor inicial",
)
ax.arrow(
    0,
    0,
    v_rot[-1, 0],
    v_rot[-1, 1],
    head_width=0.05,
    head_length=0.05,
    fc="purple",
    ec="purple",
    label="Vetor final",
)

ax.set_xlabel("Componente 1")
ax.set_ylabel("Componente 2")
ax.set_title("Rotação no espaço de fase gerada por Ω")
ax.axhline(0, color="black", linestyle="--", alpha=0.3)
ax.axvline(0, color="black", linestyle="--", alpha=0.3)
```

```
ax.legend()
ax.grid(True, alpha=0.3)
ax.set_aspect("equal")
plt.show()
```

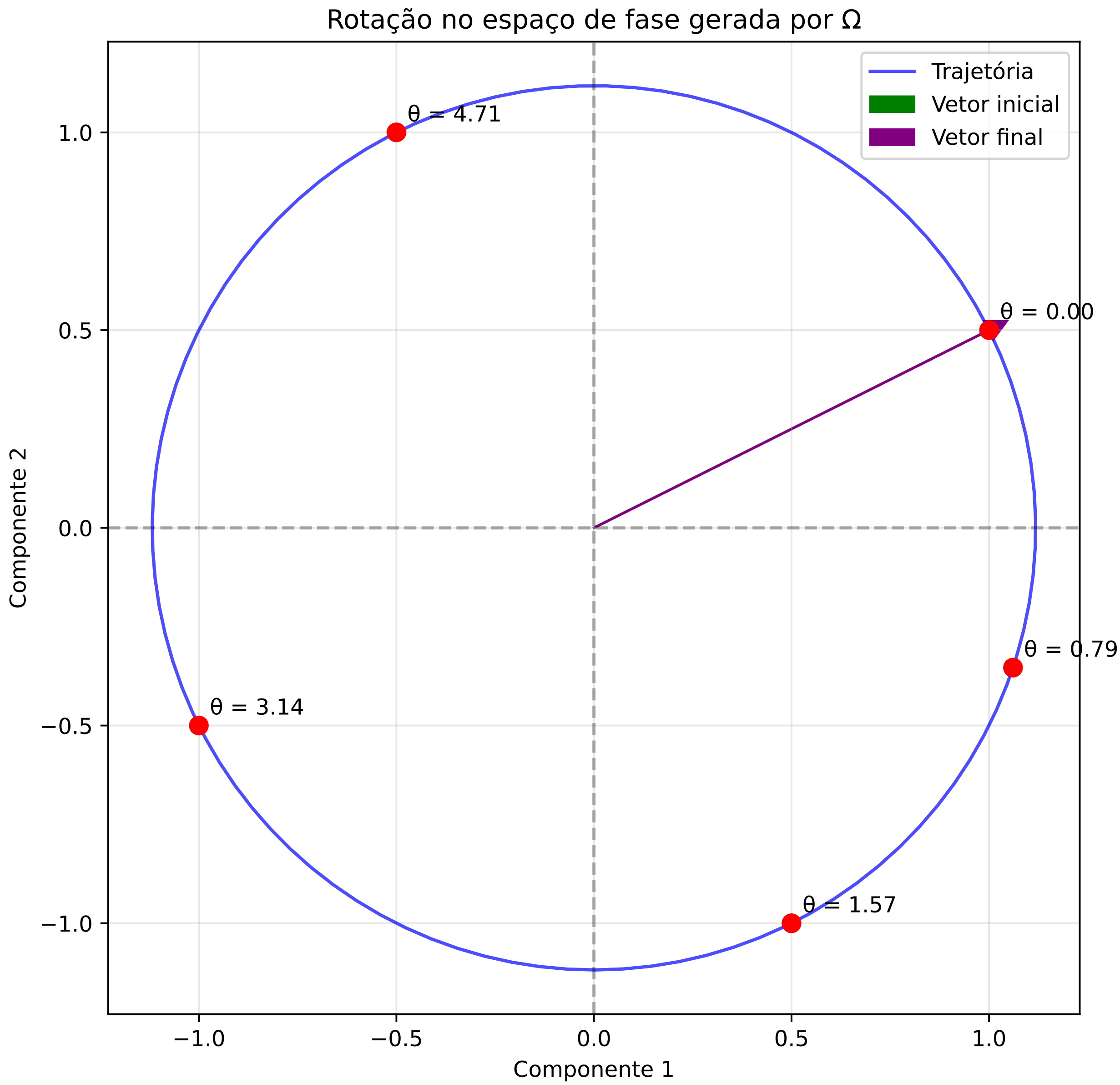

Figure 2: Rotação de um vetor no espaço de fase pela matriz Ω

Resumo

Conceito	Descrição	Importância
Equação de Helmholtz	$\nabla^2\psi = -k^2\psi$	Descreve oscilações espaciais; aparece na separação de variáveis da equação de onda
Função de Green	$G(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = -\frac{e^{ikr}}{4\pi r}$	Resposta a uma fonte pontual; contém a escolha do propagador (causal ou avançado)
Wronskiano	$W = y_1 y_2' - y_2 y_1'$	Mede independência linear de soluções; é conservado (a menos de fator exponencial)
Espaço de fase	(y, p) com $p = my'$	Representação simplética do sistema; generaliza para mecânica quântica
Matriz simplética	$\Omega = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$	Gerador de rotações no espaço de fase; análoga à unidade imaginária i
Propagadores	Causal (passado→futuro) e avançado (futuro→passado)	Ambas as escolhas são necessárias na teoria quântica de campos
Unidade imaginária	i na equação de Schrödinger	Garante preservação da probabilidade; análoga à estrutura simplética

Exercícios

Exercício 1: Soluções da Equação de Helmholtz

Considere a equação de Helmholtz unidimensional:

$$\psi''(x) + k^2\psi(x) = 0$$

a) Mostre que as soluções podem ser escritas como $\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx)$ e também como $\psi(x) = \alpha e^{ikx} + \beta e^{-ikx}$.

b) Encontre a relação entre as constantes (A, B) e (α, β).

c) Qual das representações é mais adequada para condições de contorno do tipo $\psi(0) = 0$ e $\psi(L) = 0$?

Exercício 2: Wronskiano

Para a equação $y'' + 2y' + 5y = 0$:

a) Encontre as duas soluções linearmente independentes.

b) Calcule o Wronskiano e verifique que $W' = -2W$ (confirmando a fórmula geral).

c) Qual é a constante W_0?

Exercício 3: Função de Green

Para a equação de Helmholtz em 1D:

$$(\frac{d^2}{dx^2} + k^2)G(x, x') = -\delta(x - x')$$

a) Mostre que $G(x, x') = \frac{i}{2k}e^{ik|x-x'|}$ é uma solução.

b) Qual é a diferença entre as escolhas $+ik$ e $-ik$ na exponencial?

c) Interprete fisicamente cada escolha.

Exercício 4: Espaço de Fase

Para o oscilador harmônico com $y'' + \omega^2 y = 0$:

a) Escreva as equações de Hamilton correspondentes.

b) Mostre que a Hamiltoniana $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2$ é conservada.

c) Calcule a matriz Ω e verifique que $\Omega^2 = -I$.

Exercício 5: Estrutura Simplética

Para o sistema $y'' + P(x)y' + Q(x)y = 0$:

a) Defina $p = m(x)y'$ e mostre que $m(x)$ satisfaz $m'(x) = P(x)m(x)$.

b) Mostre que o Wronskiano pode ser escrito como $W = y_1 p_2 - y_2 p_1$.

c) Verifique que $\frac{d}{dx}(y_1 p_2 - y_2 p_1) = 0$.

Exercício 6: Propagação no Espaço de Fase

Considere uma região circular no espaço de fase de um oscilador harmônico.

a) Mostre que a área da região é conservada (teorema de Liouville).

b) Como a forma da região evolui no tempo?

c) Represente graficamente a evolução para diferentes tempos.

Exercício 7: Separação de Variáveis

Considere a equação de onda em 3D:

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = \nabla^2 \phi$$

a) Faça a separação de variáveis $\phi(t, \mathbf{x}) = T(t)X(\mathbf{x})$ e obtenha as equações para T e X.

b) Mostre que X satisfaz a equação de Helmholtz.

c) Qual é a relação entre as constantes de separação?

Exercício 8: Métrica de Minkowski

Na teoria de campos, a equação de Klein-Gordon é:

$$(\Box + m^2)\phi = 0$$

onde $\Box = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2$.

a) Mostre que, ao separar variáveis com $\phi = e^{-iEt/\hbar}\psi(\mathbf{x})$, obtém-se a equação de Helmholtz.

b) Como a métrica de Minkowski (com assinatura $+---$) influencia o sinal da equação?

c) Explique por que a rotação de Wick ($t \to it$) transforma a equação de Klein-Gordon em uma equação de Laplace.

Exercício 9: Geradores de Transformação

Na mecânica quântica, a evolução temporal é dada por $U(t) = e^{-iHt/\hbar}$.

a) Mostre que $U(t)$ é um operador unitário (preserva a norma).

b) Compare com a evolução no espaço de fase clássico: $e^{t\Omega}$.

c) Qual é o análogo clássico da unidade imaginária i?

Exercício 10: Propagadores Avançados

Na teoria quântica de campos, dois propagadores são definidos:

- Causal (de Feynman): $G_F(x, x') = \frac{e^{ik|x-x'|}}{4\pi|x-x'|}$
- Avançado: $G_A(x, x') = \frac{e^{-ik|x-x'|}}{4\pi|x-x'|}$

a) Qual é a diferença de sinal entre eles?

b) Como cada propagador se comporta no limite $x \to \infty$ (condições de contorno)?

c) Por que ambos são necessários na teoria de campos?