

# 格点量子色动力学基础

冯旭

暑期学校第一周的课程主要讲的是一些基础的东西，由马建平老师给大家讲微扰 QCD 基础，我负责格点 QCD 基础这一部分。我在准备这次课程讲义的时候，主要有一个想法，就是让大家了解 QCD 的非微扰定义。因为大部分同学学习规范场论的时候都是从微扰论出发的，对于格点 QCD 可能比较陌生一点。大家可能将来并不一定真的要拿格点 QCD 去做各种数值模拟和计算，但即便如此，对于格点 QCD 的了解也能帮助大家更好地理解 QCD。

首先，推荐一些格点 QCD 方面的常用教材。书籍方面主要是

- 1) *Quantum Chromodynamics on the Lattice: An Introductory Presentation*, C. Gattringer & C. Lang
- 2) *Lattice Methods for Quantum Chromodynamics*, Thomas DeGrand & Carleton DeTar
- 3) 格点量子色动力学学导论，刘川

Lecture note 方面，美国核理论所 INT2012 年举办过一次暑期学校

- 4) *INT Summer School on Lattice QCD for Nuclear Physics* (Lecture slides 在 INT 网页上都能找到 <http://www.int.washington.edu/PROGRAMS/12-2c/Lectures.html>)

法国 Les Houches 曾经举办过两期格点方面的暑期学校，比较近的一期是

- 5) *Modern Perspectives in Lattice QCD: quantum field theory and high performance computing* (相关 lecture note 已经结集出版)
- 6) 98 年还有一次暑期学校，arXiv 上有一些零星的讲义，比方说 R. Gupta 【hep-lat/9807028】和 M. Lüscher 【hep-lat/9802029】

这些书籍和讲义，对于初学者了解格点 QCD，应该是非常有用的，我在准备这次暑期学校讲义的过程中，也有参考以上文献。

## 1 引言

谈到 QCD，就不能不说它的三个特殊性质：

- 渐近自由：

$$\alpha_s(\mu) = \frac{1}{4\pi} \frac{1}{\beta_0 \ln \frac{\mu^2}{\Lambda_{\text{QCD}}^2}}, \quad \beta_0 = \left( \frac{11N_c - 2N_f}{3} \right) / 16\pi^2 \quad (1)$$

胶子自相互作用使得 QCD 的性质和 QED 很不一样，在高能区，强相互作用耦合常数变得很小，夸克和胶子渐近自由，而在低能区，相互作用却表现出很强的非微扰特性，使得微扰论失效。

- 色禁闭：

$$V(r) = A + \frac{B}{r} + \sigma r \quad (2)$$

夸克受到 QCD 相互作用的强力束缚，带单个色荷的夸克不可能从核子中单个地分离出来，这给我们研究强子结构造成了困难

- 手征对称性自发破缺：

$$\langle \bar{q}q \rangle = \langle \bar{q}_L q_R + \bar{q}_R q_L \rangle \neq 0 \quad \Rightarrow \quad SU(N_f)_V \times SU(N_f)_A \rightarrow SU(N_f)_V \quad (3)$$

由于真空夸克凝聚，使得手征对称性自发破缺，这也造就了粒子物理世界形形色色的强子谱。首先，Goldstone 定理告诉我们会有  $N_f^2 - 1$  个无质量 goldstone boson，像 pion、kaon；除此之外，比如矢量介子和轴矢介子的能谱表现出很大的差异

$$m_\rho = 0.770 \text{ GeV}, \quad m_{a_1} = 1.26 \text{ GeV} \quad (4)$$

只有理解了 QCD 在低能区的性质，QCD 的真空结构，才能更好地帮助我们去理解强子的质量来源和相互作用行为。

格点 QCD 的应运而生，就是为了应对 QCD 的几种特殊性质。它能够非微扰地处理低能强相互作用，帮助我们研究 pion 介子、质子甚至一些轻核的强子结构的信息。（以前格点上研究的强子结构主要是与电弱流相关的形状因子、质子电荷半径之谜、质子的质量和自旋分解、以及部分子分布函数的矩等等，主要针对的是不含时的强子矩阵元；随着季向东老师提出的大动量有效理论，把含时的强子矩阵元在大动量框架下和不含时的强子矩阵元关联起来，现在格点也可以用来直接计算部分子分布函数。在这次暑期学校里面，季向东老师会向大家介绍他的大动量有效理论。）另外格点 QCD 也被用来研究色禁闭的机制以及手征对称性自发破缺、手征凝聚等。只要在一个物理过程里面，初态和末态是作为强子态出现的，那么夸克就被禁闭在强子内部，我们计算相关强子矩阵元就需要一种非微扰的处理方式。

随着计算资源的快速增加、以及算法和格点 QCD 研究手段的改进，特别是进入到 2000 年以后，格点 QCD 从淬火近似（也就是说 simulation 里面不含海夸克）到 full QCD 的 simulation，再到 physical quark mass simulation，像轻强子谱的计算以及一些简单强子的强子结构，格点 QCD 计算和实验符合得很好。如果说高能区的深度非弹实验与微扰 QCD 印证的揭示了 QCD 是强相互作用背后最基本的理论，那么低能区的强子谱和强子结构与非微扰格点 QCD 的印证实际上起到了同样的作用。需要指出的是，当前高能物理中的高精度前沿主要通过测量一些高精度的物理，比较它们与标准模型预言的差别来寻找新物理。而标准模型能否给出精确预言，很多时候依赖于我们对低能区 QCD 相互作用贡献的计算，因为这个原因，格点 QCD 在 precision flavor physics 等领域正起着举足轻重的作用。

格点 QCD 处理的对象是一个由强子构成的世界，能量尺度在  $\mu \lesssim 1 \text{ GeV}$ ，这里夸克和胶子禁闭在强子内部，而且强相互作用耦合常数在  $O(1)$  的量级，微扰论失效。在这个情况下，我们需要一种非微扰的手段来研究夸克的禁闭机制，计算强子谱以及与强子态有关的各种强子矩阵元。为了实现这个目的，一种格点的非微扰的正规化方案被提了出来。应该说，Kenneth G. Wilson 1974 年提出格点规范场论这个概念的时候，并不是直接和计算机联系在一起的。1974 年的超级计算机，运行速度大概是我们现在一台普通笔记本电脑运行速度的千分之一的量级。Wilson 提出格点规范场论，主要是要提供一个解释夸克禁闭的机制。他在强相互作用耦合常数趋于无穷的情况下，得到了静态夸克势随着正反夸克距离变大而变大的结果，从而检验了夸克禁闭。但他把他的这个工作称为模型，原因就在于，他的结论是在耦合常数趋于无穷这个极限下导出来的；另一方面，我们可以看到，因为耦合常数在  $O(1)$ ，所以我们需要非微扰的计算，需要计算机的帮助来进行数值计算；但真当耦合常数趋于无穷时，解析的计算反倒可以做出来。我们后面讲纯规范场 Wilson 圈的时候，还会讲到 Wilson 的这个工作。他文章题目叫 Confinement of quarks, PRD 10 (1974) 2445，目前引用次数 > 4600 次，感兴趣的同学可以找来看一下。

【作业：阅读 K. G. Wilson 这篇开创性的文章，就自己的阅读体会写一个文献阅读报告。】

如果用一句概括格点 QCD，那么格点 QCD 就是构建在分立的欧氏时空格子下的 QCD 理论。我们来看一下这句话里面包含了哪些关键词。

## 1.1 第一个关键词是分立的时空格子

计算机只能处理有限的自由度，因此，格点 QCD 模拟的系统有一个有限大的体积  $L$ ，有一个不为 0 的格距  $a$ ，那么在一个维度上能容纳的格点数为  $N = L/a \sim 32, 48, 64$ ，考虑到 4 维时空，总的格点数就是  $N^4$ 。

这里，有限体积  $L$  提供的是一个红外截断，而非零格距  $a$  提供了一个紫外截断。事实上，格点 QCD 提供一种非微扰的正规化方案，在给定的非零格距下，由于存在着紫外截断  $\pi/a$ ，因此不会有无穷大发散的存在。另一方面，所有重整化以后的物理量不依赖于截断，在  $a \rightarrow 0$  时不会发散，或者说它们在  $a \rightarrow 0$  都有一个好的连续极限值。原则上，我们也可以利用格点正规化来进行微扰的计算，我们通常称为 lattice perturbation theory。只是这种微扰计算比起常用的维数正规化方案来讲，可能更加复杂。但对于非微扰计算来讲，格点正规化方案却是不可或缺的。

由于在量子系统中存在粒子的产生和湮灭，能产生和湮灭的最轻的强子为 pion 介子。因此我们需要格点的体积足够大，至少 pion 介子的康普顿波长  $\sim 1/m_\pi$ ，这样才能保证 pion 介子不会受到有限体积的显著影响；换句话说，这个时候，有限体积误差才会足够小。对于稳定强子来讲，这个误差是随着体积增大而指数衰减的。经验上来讲，当  $m_\pi L \geq 4$  时，我们认为有效体积效应就不是那么重要了。这个时候，对应的  $L \sim 6 \text{ fm}$ 。在格距  $a$  还没有趋于 0 的时候，如果我们要模拟一个重夸克的系统，比方说 charm quark，质量在 1.3 GeV，那么我们就需要格距  $a$  足够小，使得  $am_c$  是个小量，目前格点上模拟的 ultra-fine lattice spacing 在 0.04 fm，对应的能量标度是 5 GeV 左右。如果既想要最大的体积，又想要最小的格距，那么格子的大小为  $150^4$ ，对于 full QCD 的 simulation 来讲，这依然是个很艰巨的任务。目前各个格点组是根据他们的物理目标进行 simulation。如果研究的物理对象对于轻夸克质量的依赖比较敏感，那么通常物理体积会足够大；这个时候格距可以取得大一点，比方说 0.11, 0.09, 0.07 fm，然后做连续极限外推得到  $a \rightarrow 0$  的结果。如果对于格距误差 (lattice artifacts) 要求比较高，那么 pion 的质量可以比物理质量重一些，比方说  $m_\pi = 400, 300, 200 \text{ MeV}$ ，然后外推到物理的 pion 质量上去。

目前我所知的最大的格点 simulation 来自 M. Lüscher 在 2017 年的格点年会上的汇报，他模拟了一个  $N = 192$  的淬火格点系统【1707.09758】。它的格距是 0.1fm，物理体积是 19.2fm。这样一个最大的  $SU(3)$  格点规范场系统的模拟是在一个 64 节点，1536 核，8.2TB 内存的机器上花了 10 天的时间模拟出来的。因为 QCD 系统并不是一个长程的系统，如果格点模拟的体积很大，那么场变量在离得很远的时候的关联很弱，或者可以认为它们的涨落是独立的。这种性质也被称为“stochastic locality”。由于计算机模拟一个  $192^4$  的格子和模拟 256 个  $48^4$  的格子所耗费的计算资源是差不多的，那么利用 stochastic locality 以及平移不变性，我们可以在一个  $192^4$  的大格子上做几百次测量，来得到比几百个  $48^4$  的规范场组态做平均上相近甚至更好的物理结果。

## 1.2 第二个关键词是欧氏时空

在 Wick 转动下，我们从闵氏时空转换到欧氏时空。位置和动量空间的 0 分量变为

$$\begin{aligned} x_0 &\equiv t \rightarrow -ix_4 \equiv -i\tau \\ p_0 &\equiv E \rightarrow ip_4 \end{aligned} \quad (5)$$

除了时间分量，欧氏时空中的其它三个分量保持不变，与闵氏时空一样。在欧氏时空下，度规取成  $(+, +, +, +)$ ，因此有

$$\begin{aligned} x_E^2 &= \sum_{i=1}^4 x_i^2 = \vec{x}^2 - t^2 = -x_M^2 \\ p_E^2 &= \sum_{i=1}^4 p_i^2 = \vec{p}^2 - E^2 = -p_M^2 \end{aligned} \quad (6)$$

我们下面来看一个闵氏时空的 2 点格林函数  $\Gamma_M(t, \vec{k}) = \int d^3\vec{x} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \langle 0|T[\hat{O}_M(\vec{x}, t)\hat{O}_M^\dagger(\vec{0}, 0)]|0\rangle$ ，其中算符  $\hat{O}(\vec{x}, t)$  在海森堡表象下可以写为

$$\hat{O}_M(\vec{x}, t) = e^{i\hat{H}t - i\hat{p}x} \hat{O}_M(\vec{0}, 0) e^{-i\hat{H}t + i\hat{p}x} \quad (7)$$

不妨取  $t > 0$ ，我们可以去掉编时乘积，那么格林函数

$$\Gamma_M(t, \vec{k}) = \int d^3\vec{x} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \langle 0|e^{i\hat{H}t - i\hat{p}x} \hat{O}_M(\vec{0}, 0) e^{-i\hat{H}t + i\hat{p}x} \hat{O}_M^\dagger(\vec{0}, 0)|0\rangle \quad (8)$$

利用 Hilbert 空间的完备性，插入能量本征态  $1 = \sum_n \int \frac{d^3\vec{p}}{(2\pi)^3} |n, \vec{p}\rangle \langle n, \vec{p}|$ ，我们得到

$$\begin{aligned} \Gamma_M(t, \vec{k}) &= \sum_n \langle 0|\hat{O}_M(\vec{0}, 0)|n, \vec{k}\rangle e^{-i\hat{H}t} \langle n, \vec{k}|\hat{O}_M^\dagger(\vec{0}, 0)|0\rangle \\ &= \sum_n \langle 0|\hat{O}_M(\vec{0}, 0)|n, \vec{k}\rangle e^{-iE_n t} \langle n, \vec{k}|\hat{O}_M^\dagger(\vec{0}, 0)|0\rangle \end{aligned} \quad (9)$$

其中  $|n, \vec{k}\rangle$  代表带动量  $\vec{k}$  的、量子数对应于  $\hat{O}_M$  算符的强子态的第  $n$  个激发态。

对于欧氏时空的 2 点格林函数  $\Gamma_E(\tau, \vec{k}) = \int d^3\vec{x} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}} \langle 0|T[\hat{O}_E(\vec{x}, \tau)\hat{O}_E^\dagger(\vec{0}, 0)]|0\rangle$ ，其算符写为

$$\hat{O}_E(\vec{x}, \tau) = e^{\hat{H}\tau - i\hat{p}x} \hat{O}_E(\vec{0}, 0) e^{-\hat{H}\tau + i\hat{p}x} \quad (10)$$

在  $t = \tau = 0$  的时间上，我们有  $\hat{O}_M(\vec{x}, 0) = \hat{O}_E(\vec{x}, 0)$ 。但当  $t = \tau \neq 0$  时，很明显  $\hat{O}_M(\vec{x}, 0) \neq \hat{O}_E(\vec{x}, 0)$ 。在 Wick 转动底下， $t \rightarrow -i\tau$ ，但哈密顿量算符  $\hat{H}$  保持不变，对于欧氏时空 2 点函数，我们有

$$\Gamma_E(\tau, \vec{k}) = \sum_n \langle 0|\hat{O}_E(\vec{0}, 0)|n, \vec{k}\rangle e^{-\hat{H}\tau} \langle n, \vec{k}|\hat{O}_E^\dagger(\vec{0}, 0)|0\rangle \quad (11)$$

很明显，欧氏时空的格林函数的时间依赖关系和闵氏时空的格林函数的时间依赖关系是不一样的。因此对于定义在闵氏时空的含时算符，或者说含时矩阵元，它们所描述的物理量，与欧氏时空所定义的物理量，往往是不一样的。解析延拓这件事情，不一定很 trivial。但是这里，希望大家注意到的是，无论在闵氏时空、还是在欧氏时空，哈密顿量是完全一样的，因此对应的能谱都一样，能量本征态也一样。由于欧氏算符和闵氏算符在时间等于 0 的时候是一样，对于不含时的强子矩阵元，比如说  $\langle 0|\hat{O}(\vec{0}, 0)|n, \vec{k}\rangle$ ，欧氏和闵氏时空得到的也是一样的。

比较了相同点，我们下面来说说闵氏时空和欧氏时空物理可能有哪些不一样的地方

- 传统的含时物理量，比如质子的部分子分布函数 (parton distribution function)

$$q(x, \mu^2) = \int \frac{d\xi^-}{4\pi} e^{-ix\xi^- P^+} \langle N(P)|\bar{\psi}(\xi^-)\gamma^+ \exp\left(-ig \int_0^{\xi^-} d\eta^- A^+(\eta^-)\right) \psi(0)|N(P)\rangle \quad (12)$$

其中质子的动量  $P^\mu$  可以取为  $z$  方向， $P^\mu = (P^0, 0, 0, P^z)$ ， $\xi^\pm = (t \pm z)/\sqrt{2}$  是光锥坐标， $t$  是闵氏时间。由于算符明显含时，我们没法在欧氏时空直接计算。解决方案：大动量有效理论 (季向东) 【1305.1539、1404.6680】等一系列文章。

- 含共振态和多粒子态的物理量。我们前面通过构造关联函数，可以提取出哈密顿量的本征态，对应的是粒子的能谱。但无论共振态还是多粒子态，它们对应的是 branch cut，在能量大于两粒子阈值的时候，能量是连续的，而在格点上，由于整个物理体积是有限的，在有限的体积中能谱必然是分立的。解决方案：有限体积方法 ( M. Lüscher ) 【Commun.Math.Phys. 105 (1986) 153, NPB 354 (1991) 531】把有限体积中计算得到的能量，转变为无穷体积中的粒子-粒子散射振幅。
- Time-like 和 space-like 区域的差别。我们来看一个真空极化函数，在闵氏时空，它可以定义为

$$\Pi_{\mu\nu}^{(M)} = \int d^4x_M e^{iqx_M} \langle 0 | J_\mu(x_M) J_\nu(0) | 0 \rangle, \quad \Pi_{\mu\nu}^{(M)} = (q_\mu q_\nu - g_{\mu\nu} q^2) \cdot \Pi^{(M)}(q^2) \quad (13)$$

这个真空极化函数对应于  $e^+e^- \rightarrow \gamma^* \rightarrow \text{hadrons}$  的过程。  $s = q^2 > 0$ ，对应 time-like 区域，这里  $s$  可以认为是末态强子的不变质量平方。根据光学定理 (从么正性导出)，这个真空极化函数的虚部，与强子谱密度 (spectral density) 成正比，可以由 BESIII 实验的 R 值测量来给出

$$\text{Im } \Pi^{(M)}(s) = 2\pi\rho(s) = \frac{R(s)}{6\pi}, \quad R(s) \equiv \frac{\sigma(e^+e^- \rightarrow \text{hadrons})}{4\pi\alpha(s)^2/(3s)} \quad (14)$$

而对于欧氏时空，做完傅立叶变换以后，我们得到

$$\Pi_{\mu\nu}^{(E)} = \int d^4x_E e^{iQx_E} \langle 0 | J_\mu(x_E) J_\nu(0) | 0 \rangle, \quad \Pi_{\mu\nu}^{(E)}(Q^2) = (Q_\mu Q_\nu - \delta_{\mu\nu} Q^2) \cdot \Pi^{(E)}(Q^2) \quad (15)$$

这里  $q^2 = -Q^2 < 0$ ，对应 space-like 区域。根据真空极化函数的解析性 (可以从因果率导出)，两个区域的物理可以通过 once-subtracted dispersion relation 关联起来

$$\Pi^{(E)}(Q^2) - \Pi^{(E)}(0) = Q^2 \int_0^\infty \frac{ds}{2\pi} \frac{\text{Im } \Pi^{(M)}(s)}{s(s+Q^2)} \quad (16)$$

在 time-like 区域，通过实验 R 值测量，我们可以看到各个共振态的峰，而 space-like 区域，真空极化函数随能量的变化是平滑的，两者的物理现象很不一样。要在格点上处理 time-like 区域的物理，也不是说没有办法，对于末态是两体散射或者两个散射道的情况，可以用 Lellouch-Lüscher 方法 【hep-lat/0003023】去处理，但对于深度非弹性的过程，末态粒子包含各种强子，目前还没有好的解决方案。

从路径积分的角度来看一个 2 点格林函数，在闵氏时空下，它可以写成

$$\langle \hat{O}_1 \hat{O}_2 \rangle_M = \frac{1}{Z_M} \int \mathcal{D}[A_\mu] \mathcal{D}[\psi] \mathcal{D}[\bar{\psi}] O_1 O_2 e^{-iS_M} \quad (17)$$

这里，配分函数  $Z$  由路径积分给出

$$Z_M = \int \mathcal{D}[A_\mu] \mathcal{D}[\psi] \mathcal{D}[\bar{\psi}] e^{-iS_M} \quad (18)$$

它在场论里面代表真空到真空的振幅。等式 (17) 的左边用的是量子场论场算符的语言，而等式右边与场算符没有任何关系，这里的  $O_{1,2}$  代表的是以规范场和费米子场为变量的泛函。注意到，在闵氏时空，路径积分带有一个权重因子  $e^{-iS_M}$ 。

如果用计算机对路径积分进行 Monte Carlo 数值模拟，那么我们需要一个高斯型的权重因子，而不是一个震荡型的分布函数。这就是为什么我们在欧氏时空去处理量子场论问题。在 Wick 转动下

$t \rightarrow -i\tau$ , 权重因子变为  $e^{-iS_M} \rightarrow e^{-S_E}$ 。这个时候的权重因子实际上相当于统计力学系统的玻尔兹曼因子。2 点格林函数可以写成

$$\langle \hat{O}_1 \hat{O}_2 \rangle_E = \frac{1}{Z_E} \int \mathcal{D}[A_\mu] \mathcal{D}[\psi] \mathcal{D}\bar{\psi} O_1 O_2 e^{-S_E} \quad (19)$$

这里

$$Z_E = \int \mathcal{D}[A_\mu] \mathcal{D}[\psi] \mathcal{D}\bar{\psi} e^{-S_E} \quad (20)$$

事实上配分函数  $Z_M$  和  $Z_E$  并没有太大区别。对于欧氏时空, 它告诉我们作用量最小的路径对于路径积分的贡献最大, 其它路径的贡献被指数压低了; 而对于闵氏时空, 大作用量对应的路径有一个剧烈震荡的因子, 在积分时贡献也会抵消掉, 出来的效果是一致的。这里我要强调一点, 把闵氏空间和欧氏空间的关联函数和路径积分分别进行比较, 不仅仅是为了说明欧氏时空场论给出的物理和闵氏时空是一致的, 更为根本的, 我们可以把欧氏时空的场论看成是量子场论的一种非微扰定义。

把与场算符相关的格林函数用路径积分的形式表达出来, 可以说是整个格点 QCD simulation 的基础。在这个基础上, 我们可以把欧氏时空路径积分系统类比为统计力学系统。对格点 QCD 做数值模拟和对一个统计力学系统做数值模拟从原理上来讲是一样的。

表 1: 欧氏时空场论 vs 经典统计力学

欧氏时空场论	经典统计力学
作用量: $S_E[\psi, \bar{\psi}, A]$	哈密顿量: $H$
路径积分权重因子: $e^{-S_E}$	玻尔兹曼因子: $e^{-\beta H}$
真空到真空的振幅: $\int \mathcal{D}[A_\mu] \mathcal{D}[\psi] \mathcal{D}\bar{\psi} e^{-S_E}$	配分函数: $\sum_{conf.} e^{-\beta H}$
真空能量	自由能
真空期望值: $\langle 0   \hat{O}   0 \rangle$	正则系综平均: $\langle O \rangle$
格林函数: $\langle 0   T[O_1 \cdots O_n]   0 \rangle$	关联函数: $\langle O_1 \cdots O_n \rangle$