

格点量子色动力学简介

刘 川

(北京大学物理学院 100871)

一、基本相互作用和标准模型

目前人类已经认识的自然界存在着四种基本相互作用，分别是：强相互作用、电磁相互作用、弱相互作用、引力相互作用。这四种基本相互作用描写了大到宇观的宇宙、小到微观的基本粒子的所有物理现象，其中当然也包括了我们日常生活中所常见的宏观物理现象。描写这些丰富的物理现象的物理理论可以大致分为两类：量子理论和经典理论，后者其实可以看成是前者的经典极限。就这四种基本相互作用的理解而言，引力相互作用是最不彻底的。我们仅仅了解其经典理论，即广义相对论，目前为止还没有公认的微观理论（即量子理论）；其他三种基本相互作用（强、弱、电磁）目前都在量子场论的框架下，统一在所谓的粒子物理的标准模型（SM）之中。

粒子物理的标准模型实际上是一个量子规范场论——具有规范对称性的量子场论。量子化的规范场是人类目前描写微观基本粒子相互作用的重要载体，它所对应的粒子（称为规范玻色子）是传递各种相互作用的中间粒子，如传递电磁相互作用的光子和传递强相互作用的胶子。标准模型包含了两大组成部分：即描写弱电相互作用的温伯格-萨拉姆模型和描写强相互作用的基本理论——量子色动力学（QCD）。QCD是仿照描写电磁相互作用的基本理论——量子电动力学（QED）构建起来的。这两个理论虽然形式上颇为类似，但也存在一些重要的区别。理论上最为显著的区别是QED的规范群是阿贝尔群 $U(1)$ ，而QCD的规范群是非阿贝尔的 $SU(3)$ 群。正是这种非阿贝尔性使得QCD中传递强相互作用的规范玻色子——胶子之间可以发生直接的相互作用而传递电磁作用的光子之间却不能。这个区别又直接导致QCD的有效耦合参数对能标的依赖关系刚好与QED中的行为相反：在高能区耦合参数变小，在低能区变强；前者

称为渐进自由，而后者则可称为红外奴役（infrared slavery），在唯象学上这对应于低能区的色禁闭现象，即人们在实验上观察到的并不是QCD中的基本自由度——带颜色的夸克和胶子，而是一些不带颜色的色单态——强子。关于这点的简单介绍，可以参考文献①。

量子场论诞生多年以来，人们能够有效处理的问题几乎都是相互作用很弱的情形。这时候人们可以利用微扰论（在量子场论中这是以费曼图为代表的微扰计算）来处理相互作用。这个方法对于QED可以很好地得到应用，因为在通常能标下电磁相互作用的典型耦合参数，即所谓的精细结构常数 $\alpha_{\text{QED}} \approx 1/137$ 的确是个体很小的数。但是对于低能区的强相互作用来说，这种计算完全是不可能的。这不仅仅在定量不正确，甚至连定性都无法给出正确的物理结果。色禁闭现象就是典型的例子。因此，传统的利用微扰论研究量子场论的方法在处理QCD的问题中遇到了巨大的困难。对于试图描述自然界所有相互作用的基本理论来说，人们迫切需要一种系统的处理强耦合量子场论系统的方法，目前为止已知的只有格点场论的方法。

由于非微扰性质集中地出现在QCD之中，因此大部分从事格点场论研究的人员都是研究格点量子色动力学（Lattice QCD）的。但是格点的研究方法原则上也可以运用于非QCD的理论研究中，例如超出标准模型的新物理、凝聚态强关联系统等。需要指出的是，非微扰的性质实际上广泛存在于所有具有相互作用的量子场论之中。即使是在高能区域QCD可以很好地运用微扰论来处理，这时仍然存在着大量的微扰论不可计算的物理量。如果我们希望计算这些量，我们就需要非微扰的理论方法。当然在中低能区的强子物理中，这些非微扰性质更加显著，在许多问题中甚至是主导性的。因此，对于中低能的强子物理的研究，目前公认的最为可靠的从QCD基本自由度出发的理

论框架就是 Lattice QCD。

二、格点量子色动力学的理论框架

前面提到 Lattice QCD 是从 QCD 的基本自由度出发的，即用夸克场 $\psi(x)$ 、反夸克场 $\bar{\psi}(x)$ 、胶子场 $U_\mu(x)$ 来描写。这些场被定义于四维欧氏空间的一套分立的格点上（通常取为简单超立方晶格）。为方便起见，在格点 QCD 中将格距取为长度单位。四维欧氏空间的格点有四个主晶轴方向，一般记为 $\mu=0, 1, 2, 3$ ，其中 0 一般用来特指虚时间方向。物质场（夸克场和反夸克场）被定义于格子的交叉点（我们称之为格点，site） x 上而胶子场 $U_\mu(x)$ 则定义在从任意一个格点 x 到沿正的 μ 方向的相邻的格点——一般记为 $x+\hat{\mu}$ 的连接（link）上。在图 1 中我们显示了四维格点中的三维以及相应的场，其中 μ, ν, σ 标志了三个相互垂直的方向（即 0, 1, 2, 3 中的任意三个方向）。

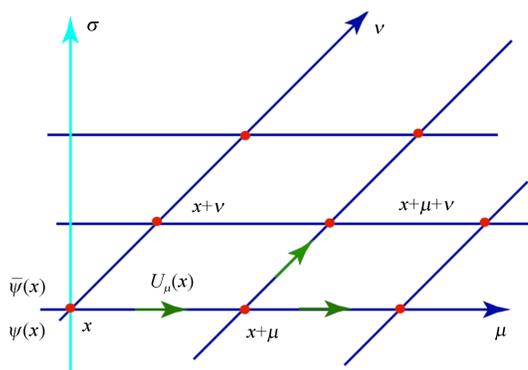


图 1 格点 QCD 理论框架的示意图。四维超立方晶格中的三维被显示在此图中。取值 Grassmann 数的物质场 $\psi(x)$ 和 $\bar{\psi}(x)$ 被定义在晶格的交叉点上；而规范场 $U_\mu(x) \in \text{SU}(3)$ 则定义在两个相邻格点的链接上

从这些场的值域来看，夸克、反夸克场由于需要描写费米子，因此它们是所谓的 Grassmann 变量；规范场则属于相应的规范群，具体到 QCD 来说，这个群是 $\text{SU}(3)$ ，因此我们有 $U_\mu(x) \in \text{SU}(3)$ 。Lattice QCD 的作用量 $S_{\text{LQCD}}[\psi(x), \bar{\psi}(x), U_\mu(x)]$ 可以写为两项之和：

$$S_{\text{LQCD}}[\psi(x), \bar{\psi}(x), U_\mu(x)] = S_g[U_\mu] + S_f[\psi, \bar{\psi}, U_\mu], \quad (1)$$

其中的第一项 $S_g[U_\mu]$ 仅仅依赖于规范场，体现了

规范场的动能项以及规范场之间的直接相互作用；第二项则依赖于所有的场 $S_f = \sum_{x,y} \bar{\psi}_x M_{x,y}[U_\mu] \psi_y$ ，它体现了夸克、反夸克与胶子间的规范相互作用。矩阵 $M_{x,y}[U_\mu]$ 被称为费米子矩阵，其具体形式依赖于格点费米子实现的方案。有了作用量格点 QCD 的定义可以由欧氏空间的路径积分给出：

$$Z = \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \mathcal{D}U_\mu \exp(-S_{\text{LQCD}}[\bar{\psi}, \psi, U_\mu]) = \int \mathcal{D}U_\mu e^{-S_g[U_\mu]} \det M[U_\mu], \quad (2)$$

式(2)形式上十分类似于统计物理中的系综配分函数，对任何一个由原初夸克场、反夸克场、胶子场构成的“物理量” $O[\bar{\psi}, \psi, U_\mu]$ 可由下式给出：

$$\langle O \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \mathcal{D}U_\mu O[\bar{\psi}, \psi, U_\mu] \times \exp(-S_{\text{LQCD}}[\bar{\psi}, \psi, U_\mu]), \quad (3)$$

即可以看成是相应的算符 $O[\bar{\psi}, \psi, U_\mu]$ 在概率密度

$$P[U_\mu] = Z^{-1} e^{-S_g[U_\mu]} \det M[U_\mu], \quad (4)$$

中的期望值。需要注意的是，这个概率密度中的费米子行列式 $\det M[U_\mu]$ ，它代表了理论中所谓的海夸克效应（用微扰论的语言，它们对应于费米子圈的贡献）。由于费米子矩阵在味道空间是对角的，因此这个行列式实际上是各个味道的费米子行列式的乘积。

如果最后的结果使得 $\det M[U_\mu]$ 为一非负实数，那么 $P[U_\mu]$ 的确可以解释为概率密度，这时下面提及的蒙特卡罗算法可以适用；反之，如果这一点不能被满足，那么计算需要进行额外的处理。这种困难目前仍然存在于有限密度 QCD 的模拟之中。不过在这个介绍中我们将不会涉及。其实类似的费米子行列式的问题也出现在凝聚态物理和统计物理模型的数值模拟之中，并且被称为“符号问题”。

表达式(1)~(3)可以说给 QCD 下了一个非微扰的定义。准确地说，它定义了欧氏空间的一个量子场论。可以证明对于满足一定条件的作用量来说，这样定义的欧氏空间的量子场论实际上也对应于一个闵氏空间的量子场论。因此，有了这个非微扰的定义

之后，原则上既可以进行微扰的计算，也可以进行非微扰的计算。至此格点 QCD 的理论框架就完全确立了。

读者也许希望了解格点 QCD 与所谓连续空间 QCD 之间的关系，下面我们就简单谈谈这个问题。任何一个格点 QCD 的数值计算，都是在有限格距 a ，有限体积 L^4 下进行的。因此，概括地说，我们希望的连续空间 QCD 可以看成是格点 QCD 在 a 趋于零， L 趋于无穷时的结果。这些都可以归类为系统误差。当然还可能存在其他类型的系统误差。一个典型的情形是由于采用比实际的夸克质量大的流夸克质量带来的误差；此外，由于格点计算是利用蒙特卡罗方法，因此不可避免地也带有统计误差。统计误差的减小从根本上说依赖于有效统计量的增加，这点与真实的实验非常类似。下面进一步看看系统误差，特别是有限格距带来的误差。

我们知道四维空间中的有相互作用的量子场论中一般都有紫外发散，而格点的存在恰恰为这些理论提供了一个紫外截断。换句话说，格点提供了一种正规化方法。粗略地说，对于格距是 a 的格点，它天然的紫外截断的量级为 π/a ——这实际上就是四维晶格的倒空间中第一布里渊区的大小。所以，格距趋于零的过程就是将量子场论中紫外截断趋于无穷的过程，也就是进行重整化的过程。前面给出的格点 QCD 理论实际上是定义在截断能标 π/a 的理论。如果我们对于远低于截断能标 $\mu \ll \pi/a$ 的低能区物理感兴趣，就需要考察相应能标的物理量。即可以将能标在 μ 以上的自由度积掉，这正好对应于威尔逊 (Wilson) 的重整化群的图像。也就是说，所谓的连续极限实际上就是一个进行重整化群变换的过程。另一方面，格点理论可以看成是四维欧氏空间中一个特殊的“统计模型”。我们所关心的物理能标的倒数 (它具有长度量纲) 在统计物理中称为关联长度 $\xi=1/\mu$ 。上述的所谓连续极限对应于 ξ/a 趋于无穷的过程，这在统计模型的角度来看就是该模型趋于二级相变临界点的过程。正是基于这种观察，威尔逊当年利用场论中的重整化群方法揭示了统计物理中临界现象的本质。

三、蒙特卡罗模拟

给出 QCD 的非微扰定义固然非常重要，但是如

果没有切实可行的计算方法来进行真正意义上的非微扰计算，那么格点 QCD 将仅仅具有纯学术的意义。

正如前面提到的，在格点 QCD 的理论框架中，任何的物理量可以看成是某个算符在一定概率分布下的期望值，这一点恰恰是蒙特卡罗数值模拟发挥其作用的地方。

格点 QCD 的数值计算总体来说包含以下两个大的步骤：

第一步是规范场组态的产生。通过蒙特卡罗的方法 (利用一个 Markov 链) 用计算机来产生具有下列概率分布规范场组态：

$$P[U_\mu] = \frac{1}{Z} \exp(-S_g[U_\mu]) \det M[U_\mu].$$

一旦产生了按照上式分布的规范场组态，我们可以将这些具有正确概率分布的组态 $\{U_\mu(x)\}$ 存储起来。我们将这些储存起来的规范场组态记为： $\{U_\mu^{(i)}(x) : i=1,2,\dots,N\}$ 。这一步往往也是格点 QCD 中最为耗费计算资源的部分。

第二步是相关物理量的测量。对于任何由原初的夸克场、反夸克场，规范场构成的物理量 $O[\psi, \bar{\psi}, U_\mu]$ ，首先将其中的所有费米子场用它们的缩并来替代——这又被称为 Wick 收缩 (Wick contraction)： $O[\psi, \bar{\psi}, U_\mu] \Rightarrow O[\langle \psi \bar{\psi} \rangle [U_\mu]; U_\mu]$ ，其中的费米场的缩并可以通过数值计算费米子矩阵的逆矩阵相应的矩阵元获得： $\langle \psi_x \bar{\psi}_y \rangle = M_{x,y}^{-1}[U_\mu]$ 。最后，算符 $O[\psi, \bar{\psi}, U_\mu]$ 的期望值可以用 N 次取样的平均值来替代：

$$\langle O \rangle \approx \bar{O} \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N O_i,$$

其中 O_i 是我们感兴趣的物理量 (在所有的费米子场都用相关的 Wick 缩并替代后) 在第 i 个组态中的测量值，即前面给出的 $O_i \equiv O[\langle \psi \bar{\psi} \rangle [U_\mu^{(i)}]; U_\mu^{(i)}]$ 。

目前上述步骤中的第一步一般都是由具有大量计算资源的大型格点合作组完成。他们通过多年的努力产生了不同参数的格点规范场组态。这些组态中

的相当一部分可以在 ILDG (International Lattice Data Grid) 的框架下共享给全世界进行格点研究的学者。按照它们在海中包含费米子味道的数目, 这些组态可分为 $N_f=2$, $N_f=2+1$, $N_f=2+1+1$ 等, 当然每一种情形又可以按照其不同的费米子种类分为 Wilson, Staggered, Domain Wall, 等等。上述步骤中的第二步则有世界上多个格点合作组参与, 包括我们中国的格点合作组 CLQCD (China Lattice QCD)。

以上的两步是格点数值计算中的两个最主要的步骤。其实在测量了感兴趣的物理量 $\langle O \rangle$ 之后, 还需要对所测量的数据进行数据分析。这个后续步骤其实也是十分重要的。这个过程又可以分为两类: 第一类是我们最终希望得到的物理量, 就是我们直接测量的物理量 $\langle O \rangle$; 第二类是我们所测量的物理量 $\langle O(\lambda) \rangle$ 依赖于我们最终感兴趣的物理量 λ 。对于第一类情形, 我们只需要对测量数据进行相应的误差分析就够了。任何有限取样的数值都会与物理真实的值(期望值)有一定偏差, 但是这种偏差(误差), 就像我们真实物理实验一样, 一定会随着取样数目 N 的增加而按照 $1/\sqrt{N}$ 减小。因此格点计算中不仅仅可以给出相应物理量的中心值, 一般还需要给出其相应的误差。这一点很像物理中的实验测量。从某种意义上说, 它相当于借助于计算机进行的“理想实验”。对于第二类情形, 我们感兴趣的物理量 λ 通过某种函数进入我们所直接测量的量 $\langle O(\lambda) \rangle$ 。这时我们往往要通过对测量的数据进行拟合来抽取那些非直接测量的物理量 λ 。

总体来说, 格点 QCD 就其理论框架而言虽然并不依赖于计算资源, 但就其实际计算而言非常依赖于数值计算的资源, 属于典型的大规模数值计算。上面提及的两个大的步骤, 一般都需要在大型计算机上面实现。只有最后的后续数据分析也许可以在普通的小型机器上面实现。与物理学特别是理论物理的其他分支相比, 这一点从某个角度来说也是一种潜在的“优势”, 因为按照计算机发展的摩尔定律, 每过大约 18 个月我们的计算能力就提升一倍。也正是这种积累加上格点 QCD 理论方面的进展使得最近 5 年内格点

QCD 获得了突飞猛进的发展和更加广泛的认可。

四、近年来格点 QCD 的进展

近年来, 特别是近五年来, 格点量子色动力学发生的最根本的变化就是基本完成了从淬火(quenched)近似计算到非淬火(unquenched)计算的“相变”。这个相变非常重要。正是由于这种转变, 近年来格点 QCD 的计算越来越多地受到高能物理界的重视。下面我们就介绍一些这方面的例子。更多的例子可以参考文献②。

强子谱的计算

作为强相互作用的基本理论, QCD 应当可以“预言”由夸克胶子构成的“强子”的性质, 其中最为典型的就是轻强子谱的计算。这包含了构成我们自然界中最常见物质的质子、中子(它们在强相互作用下非常类似)等重子, 也包括诸如 π 介子、 ρ 介子、K 介子等介子的质量。这类计算其实在 quenched 格点 QCD 中就被广泛计算过。那里遗留的一些问题随着 unquenched 计算时代的到来获得了圆满解决。

图 2 显示了 BMW (Budapest-Marseille-Wuppertal) 合作组计算的轻强子谱与实验的比较。我们发现, 只要给定 3 个输入参数(图中的 π 介子、K 介子、 Ξ 重子)就可以计算出其他轻强子的质量, 格点 QCD 的结果与实验的结果高度吻合。更多的计算细节可以参考文献③、④。

不仅仅轻强子谱可以得到很好的吻合, 包含重味夸克(指粲夸克或底夸克)的强子谱也可以通过格点计算获得。图 3 中显示的就是 HPQCD 合作组计算

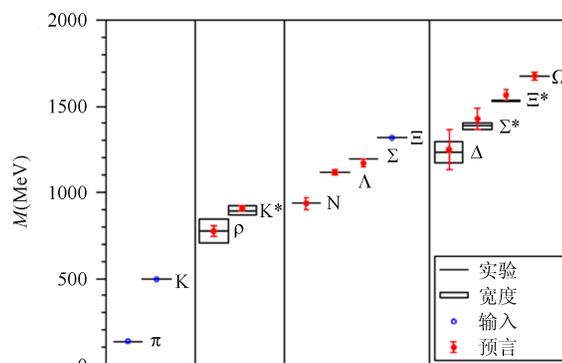


图 2 BMW 合作组计算的轻强子谱与实验的对比^{②③}

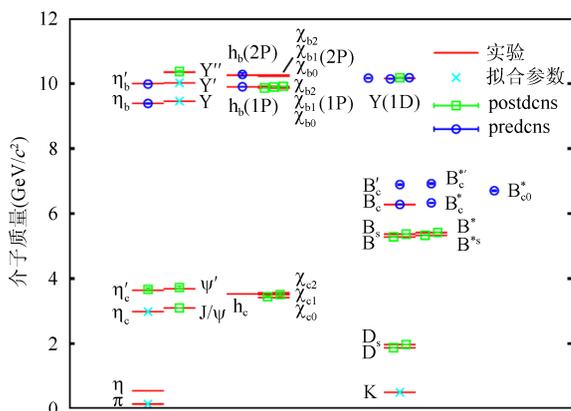


图3 HPQCD 计算的包含重味夸克的介子谱与实验的对比^⑤，其中方块属于在格点计算时，与已经发现的强子谱的对比 (postdiction)，而圆点是对当时尚未发现的强子的预言 (prediction)。注意，其中有些后来被实验发现并与格点结果高度吻合。叉代表用于固定参数的点

的一些包含重夸克介子的谱^⑤。特别值得一提的是，在重味强子的计算中，某些强子甚至在格点计算之前还没有在实验上被发现，因此属于真正的“预言” (prediction) 而不是“赘言” (postdiction)。随后，有些强子 (例如图中的 η_b 、 B_c 、 h_b 等) 在实验上被发现并且实验上获得的结果与格点计算高度吻合。

强子矩阵元的计算

另外一方面可以计算的是强子矩阵元。在粒子物理的研究中非常广泛地需要计算各种强子矩阵元： $\langle H_f | J | H_i \rangle$ ，其中 H_i 、 H_f 代表初态和末态的两个强子，中间的算符 J 一般是由夸克、反夸克、胶子场构成的具有某种对称性的算符。这类矩阵元往往涉及非微扰的物理，因此必须利用非微扰的理论框架进行计算。一个典型的例子是所谓的质子的电磁形状因子的计算，这时初末态的强子都是质子而中间的算符是电磁流算符。当然，初末态的强子并不一定要是相同的，甚至不一定是普通的强子，也可以是一些目前还没有被发现的奇特强子态。

前面也曾经提到，光子之间无法存在直接的相互作用。也就是说，在量子电动力学的框架下，如果我们完全不考虑正负电子，仅仅考虑光子场。我们得到的实际上只是无相互作用的自由的电磁场。但是在 QCD 中，作为非阿贝尔规范场的粒子 (胶子) 则不同。

即使完全不考虑夸克反夸克的存在 (或者说将它们都 quench 掉)，仅仅考虑胶子场我们仍然得到一个有相互作用的理论，这称为纯杨-米尔斯规范场论。在这个理论中，基本的动力学自由度只有胶子，胶子之间可以发生相互作用并且也可以构成束缚态的强子。这类强子一般称为胶球。胶球至今还没有找到，但一直是实验上寻找的热点之一。一般认为，在粲偶素的辐射衰变中是寻找胶球候选者的理想通道。由于具有全球最大的粲偶素样本，我国的北京谱仪因此也成为寻找胶球最有竞争力的实验室。从理论方面讲，要给出粲偶素辐射衰变到胶球的计算并不容易。这涉及非微扰的物理而目前已知的最为可靠和系统地处理这类问题的理论框架就是格点 QCD。

图4显示了中国格点合作组最近计算的粲偶素到张量胶球的辐射跃迁矩阵元^⑥，他们之前还计算了粲偶素辐射衰变到标量胶球的矩阵元^⑦。这些矩阵元的

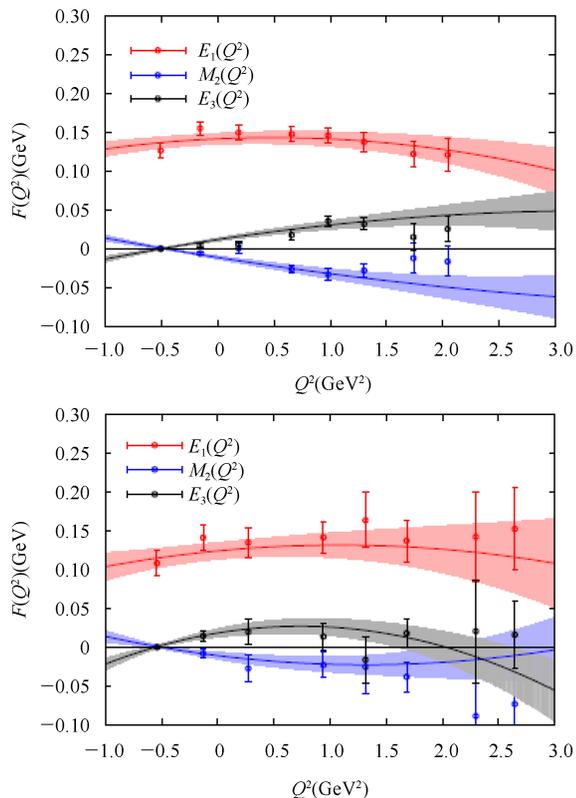


图4 中国格点合作组计算的粲偶素辐射衰变到纯张量胶球的矩阵元。该矩阵元涉及三个形状因子，它们在动量转移平方 $Q^2=0$ 的数值直接与衰变宽度联系^⑥

她用物理的情趣，引我们科苑揽胜； 她用知识的力量，助我们奋起攀登！

欢迎投稿，欢迎订阅

《现代物理知识》杂志隶属于中国物理学会，由中国科学院高能物理研究所主办，是我国物理学领域的中、高级科普性期刊。

为进一步提高《现代物理知识》的学术水平，欢迎物理学界的各位专家、学者以及研究生为本刊撰写更多优秀的科普文章。投稿时请将稿件的 Word 文档发送至本刊电子信箱 mp@mail.ihep.ac.cn，并将联系人姓名、详细地址、邮政编码，以及电话、电子信箱等联系方式附于文章末尾。

所投稿件一经本刊录用，作者须将该篇论文各种介质、媒体的版权转让给编辑部所有，并签署《现代物理知识》版权转让协议书（全部作者签名），如不接受此协议，请在投稿时予以声明。来稿一经发表，将一次性酌情付酬，以后不再支付其他报酬。

《现代物理知识》设有物理知识、物理前沿、科技经纬、教学参考、中学园地、科学源流、科学随笔和科苑快讯等栏目。

2015 年《现代物理知识》每期定价 10 元，全年 6 期 60 元，欢迎新老读者订阅。

邮局订阅 邮发代号：2-824。

编辑部订阅 汇款到：北京市玉泉路 19 号乙高能物理所《现代物理知识》编辑部；邮编：100049。

需要过去杂志的读者，请按下列价格汇款到编辑部。1992 年合订本，18 元；1993 年合订本，18 元；1994 年合订本，22 元；1994 年增刊，8 元；1994 年附加增刊合订本，36 元；1995 年合订本，22 元；1996 年合订本，26 元；1996 年增刊，15 元；1997 年合订本，30 元；2000 年附加增刊合订本，38 元；2000 年增刊，10 元；2001 年合订本，48 元；2002 年合订本，48 元；2003 年合订本，48 元；2004 年合订本，48 元；2006 年仅剩 4、5、6 期，每期 7 元；2007 ~ 2011 年单行本每期 8 元；合订本每本 50 元；2012 ~ 2014 年单行本每期 9 元，合订本每本 60 元。

计算可以帮助我们在粲偶素的辐射跃迁中寻找胶球存在的迹象。有关的计算细节有兴趣的读者可以参考上述两个具体的文献。

五、结束语

本文着重介绍了格点量子色动力学的理论框架及其在整个粒子物理标准模型中的地位和作用，同时给出了格点 QCD 计算的几个典型例子，展示了格点结果与实验的比较。限于篇幅这里不可能对格点计算的例子给出哪怕是非常粗线条的完整一些的描述，更多的例子读者可以参考文献^②中的介绍以及那里引用的文献。总体来说，对于描写强相互作用的基本理论——量子色动力学，由于它的非微扰特性，我们迫切需要

非微扰的理论手段，而格点 QCD 是目前已知的这方面最系统的理论框架。我们非常希望通过这个不算长的简介能够吸引更多的有兴趣的年轻学者参与到格点 QCD 这个方兴未艾的方向中来。

- ① 刘川，“奔向自由——2004 年诺贝尔物理学奖介绍”，《物理通报》2004 年第 11 期，第 1 页。
- ② C. Liu, *Int.J.Mod.Phys.Conf.Ser.* 31 (2014) 1460282.
- ③ S. Durr *et al* (Budapest-Marseille-Wuppertal), *Science* 322 (2008) 1224.
- ④ Z. Fodor and C. Hoelbling, *Rev.Mod.Phys.* 84 (2012) 449.
- ⑤ C. McNeile *et al* (HPQCD), *Phys. Rev. D* 86 (2012) 074503.
- ⑥ L.-C. Gui *et al* (CLQCD), *Phys.Rev.Lett.* 110 (2013) 021601.
- ⑦ Y.-B. Yang *et al* (CLQCD), *Phys.Rev.Lett.* 111 (2013) 091601.