



中国科学院大学
University of Chinese Academy of Sciences

博士学位论文

轻强子性质的格点 QCD 研究

作者姓名: 蒋翔宇

指导教师: 陈莹 研究员 中国科学院高能物理研究所

宫明 副研究员 中国科学院高能物理研究所

学位类别: 理学博士

学科专业: 理论物理

培养单位: 中国科学院高能物理研究所

2023 年 6 月

Light hadron properties from lattice QCD

**A dissertation submitted to
University of Chinese Academy of Sciences
in partial fulfillment of the requirement
for the degree of
Doctor of Philosophy
in Theoretical Physics**

By

JIANG Xiangyu

Supervisor: Professor CHEN Ying

Professor GONG Ming

Institute of High Energy Physics, Chinese Academy of Sciences

June, 2023

中国科学院大学 学位论文原创性声明

本人郑重声明：所呈交的学位论文是本人在导师的指导下独立进行研究工作所取得的成果。承诺除文中已经注明引用的内容外，本论文不包含任何其他个人或集体享有著作权的研究成果，未在以往任何学位申请中全部或部分提交。对本论文所涉及的研究工作做出贡献的其他个人或集体，均已在文中以明确方式标明或致谢。本人完全意识到本声明的法律结果由本人承担。

作者签名：

日 期：

中国科学院大学 学位论文授权使用声明

本人完全了解并同意遵守中国科学院大学有关收集、保存和使用学位论文的规定，即中国科学院大学有权按照学术研究公开原则和保护知识产权的原则，保留并向国家指定或中国科学院指定机构送交学位论文的电子版和印刷版文件，且电子版与印刷版内容应完全相同，允许该论文被检索、查阅和借阅，公布本学位论文的全部或部分内容，可以采用扫描、影印、缩印等复制手段以及其他法律许可的方式保存、汇编本学位论文。

涉密及延迟公开的学位论文在解密或延迟期后适用本声明。

作者签名：

日 期：

导师签名：

日 期：

摘要

对轻强子性质的研究是我们理解强相互作用低能非微扰性质的重要途径，而 J/ψ 辐射衰变是研究轻强子性质的理想场所。北京正负对撞机和北京谱仪 (BEPCII/BESIII) 积累了 10^{10} 量级的 J/ψ 事例样本，在轻强子性质研究方面有独特的优势，但需要理论研究提供可靠的理论信息。格点量子色动力学 (lattice quantum chromodynamics, 格点 QCD) 是从第一性原理出发研究 QCD 的非微扰方法，在强相互作用低能性质研究中，例如强子谱学、强子-强子相互作用、强子矩阵元等方面有不可替代的重要作用。本论文的研究内容是针对 BESIII 相关的重要物理问题，基于自主产生的适合谱学研究的各向异性格点规范系综，开展若干轻强子性质的研究。

本文首先介绍了格点 QCD 的理论框架，并对我们工作中所有使用到的作用量形式以及数值方法进行了简单的推导和说明。随着近年计算资源的发展和进步，我国格点 QCD 研究的组态产生工作取得了较大进展。我们依托自有的计算资源，在一个各向异性格点上产生了包含 $N_f = 2$ 简并的动力学 u, d 夸克的大统计量规范系综。我们对这个规范系综进行了参数标定和验证性分析工作。我们提出一个全新的、对轻夸克质量不敏感的格距定标方案，即利用实验结果显示的、轻或重-轻赭标量介子和矢量介子的质量平方差接近常数 $\Delta m^2 \approx 0.568(8) \text{ GeV}^2$ 这一经验公式来确定格距。我们后续产生的系综证实，在手征极限下，该方案确定的格距和 Wilson 流方案确定的格距在误差范围内相符。我们仔细确定了夸克参数对应的 π 介子质量，各向异性参数，以及这些组态的自相关性质，并给出误差分析中的一些必要的手段。同时，我们针对 GPU 集群资源开发了一个 Python 程序包 PyQuda，在蒸馏方法的框架下实现了从求解 Laplace 算符本征向量到计算强子关联函数的完整功能。在 J/ψ 辐射衰变到 1^- 末态的研究中，PyQuda 总共完成了约 1800 万次线性方程组求解。

在完成该系综的标定和验证后，我们对 $N_f = 2$ 情形的味道单态（同位旋单态）赭标量粒子 $\eta_{(2)}$ 的性质进行了研究。实验上发现赭标量介子 η' （主要为味道单态）在 J/ψ 辐射衰变中产率很大，因此有理论观点认为 η' 有较大的胶球成分。为探讨这一问题，我们基于上述大统计量规范系综研究了 $\eta_{(2)}$ 和赭标量胶球的混合问题，计算中涉及到的夸克连通图和非连通图都通过蒸馏方法实现。我们首先计算了在系综参数 $m_\pi \approx 350 \text{ MeV}$ 下 $\eta_{(2)}$ 的质量为 $m_{\eta_{(2)}} = 714(6)(16) \text{ MeV}$ ，这个质量和解释 η' 质量疑难的 Witten-Veneziano 机制的预期是一致的。这反映了 QCD 的 $U_A(1)$ 反常（轴反常）对味道单态的赭标量介子的性质有重要影响。我们从胶球算符和 $\eta_{(2)}$ 算符的关联函数出发，通过态混合模型得到了混合能量和混合角绝对值分别为 $|x_1| = 107(15)(2) \text{ MeV}$ 和 $|\theta| = 3.46(46)^\circ$ ，相应的基态赭标量胶球质量 $m_G \approx 2.5 \text{ GeV}$ 。这是首个关于该问题的格点 QCD 计算结果。显然，这个混合角非零但很小，这提示我们在研究 $\eta_{(2)}$ 性质时，可以忽略混合效应（相

应在物理的 $N_f = 3$ 情形中，研究 η' 性质时也可以忽略这种混合效应)。

轻强子在 J/ψ 辐射衰变中的产率是我们研究的主要内容，其理论预言可以结合胶球产率的格点预言为实验确定胶球态提供更完整的理论判据。我们从计算 $J/\psi \rightarrow \gamma\eta_{(2)}$ 的分宽度出发开展研究。一方面，在我们的格点体系下 $\eta_{(2)}$ 是稳定粒子，理论上处理比较简单；另一方面，我们也将探讨 η' 在该过程中产率大的背后物理机制。我们在蒸馏算法框架下计算了插入一个电磁流的三点关联函数，最终得到该衰变过程的在壳的电磁形状因子 $M(0) = 0.01051(61) \text{ GeV}^{-1}$ 。假设 $U_A(1)$ 反常在这类衰变中占主要贡献，并考虑 η 和 η' 之间的混合角为 $\theta_{\text{lin}} = -24.5^\circ$ ，我们在国际上首次给出了 η 和 η' 介子在 J/ψ 辐射衰变中产率的理论预言分别为 $1.15(14) \times 10^{-3}$ 和 $4.49(53) \times 10^{-3}$ ，这和实验值 $1.13(3) \times 10^{-3}$ 和 $5.25(7) \times 10^{-3}$ 在误差范围内相符，这也进一步反映了我们假设 QCD 的轴反常在此过程起主导作用的合理性。我们的结果显示了格点 QCD 在研究 J/ψ 辐射衰变到轻强子末态的过程中有很大的潜力。另外，我们也完成了 $I^G J^{PC} = 0^+ 1^{-+}$ 的轻混杂态 η_1 在 J/ψ 辐射衰变中的产率的计算。

我们也尝试了轻标量介子的辐射产率的相关研究，但发现对此过程，标量介子衰变以及 $\pi\pi$ 等多强子末态的混合效应都不可忽略，我们正在探讨解决这些困难的方案。另外目前我们仅有一个格距，一些未能控制的系统误差，例如 $SU(2)$ 近似，手征外推和连续极限，这些都需要在未来解决。

关键词：格点量子色动力学，轻强子，胶球， J/ψ 辐射衰变

Abstract

In order to understand the non-perturbative properties of the strong interaction at the low energy scale, it is important to study the properties of light hadrons. The J/ψ radiative decay is an ideal playground for the study of light hadrons. BEPCII and BESIII have collected a sample of J/ψ events in the order of 10^{10} , which have unique advantages for the study of light hadrons, but require reliable information from theoretical studies. Lattice quantum chromodynamics (LQCD) is a non-perturbative method from first principles to study the QCD system, and has played an irreplaceable role in the study of low-energy properties of the strong interaction, such as hadron spectroscopy, hadron-hadron interaction, hadron matrix element, etc. In this paper, we focus on important physical problems related to BESIII. We carry out several investigations on the properties of light hadrons based on our anisotropic lattice, which is well suited for spectroscopic studies.

The article first presents the theoretical framework of LQCD, and then gives a simple introduction and derivation of all the LQCD actions and numerical methods used in our work. With the development of computational resources in recent years, the generation of LQCD configurations in our country achieves a decent improvement. We have generated a LQCD ensemble with large statistics on an anisotropic lattice, containing $N_f = 2$ degenerated dynamical u, d quarks. We have performed parameter calibration and validation analysis work on this gauge ensemble. We purposed a brand new scaling scheme, which is insensitive to the mass of the light quarks. The idea is to use the squared mass differences of the pseudoscalar and the vector meson, which are of light $q\bar{q}$ or heavy flavor. The experimental value of this is almost a constant $\Delta m^2 \approx 0.568(8) \text{ GeV}^2$, and we use this empirical formula to determine the lattice spacing. We have generated further ensembles and confirm that the lattice spacing estimated by this scheme and the Wilson flow scheme are consistent while at the chiral limit. We carefully determined the π mass corresponding to the quark mass parameter, the anisotropy, and the autocorrelation properties of these configurations, and gave the necessary trick to do the error analysis. We have also developed a Python package called PyQuda for the GPU cluster resources we have, which implements the complete functionality from solving the eigensystem of the Laplace operator eigenvectors to calculating hadron correlation functions, under the framework of distillation method. PyQuda has computed about 18 million inversions in the study of J/ψ radiatively decaying into the light 1^{-+} hybrid.

We started to study the flavor singlet (isoscalar) pseudoscalar meson in $N_f = 2$ case, namely $\eta_{(2)}$, after calibrating and verifying the ensemble. The production rate of the pseudoscalar meson η' (mainly flavor singlet) is observed to be pretty large in exper-

iment, and some theoretical analyses say that η' has a large glueball content. To investigate this problem, we study the mixing of $\eta_{(2)}$ and pseudoscalar glueball based on the large ensemble described above, and all connected and disconnected diagrams of quarks are calculated by using the distillation method. First, we determined the $\eta_{(2)}$ mass to be $m_{\eta_{(2)}} = 714(6)(16)$ MeV, while the ensemble parameters get $m_\pi \approx 350$ MeV. The mass of $\eta_{(2)}$ is consistent with the expectation of the Witten-Veneziano mechanism, which was purposed to explain the η' mass puzzle, which shows that the QCD $U_A(1)$ anomaly (axial anomaly) has an important influence on the flavor singlet pseudoscalar meson. We started with the correlation function between the pseudoscalar glueball operator and the $\eta_{(2)}$ operator, and then extracted the absolute value of the mixing energy and the mixing angle to be $|x_1| = 107(15)(2)$ MeV and $|\theta| = 3.46(46)^\circ$, respectively. These values are obtained under the state mixing model and the corresponding base state mass of the pseudoscalar glueball is $m_G \approx 2.5$ GeV. This is the first LQCD calculation on this subject. The mixing is not zero but small, which implies that we could ignore the mixing while studying the properties of the $\eta_{(2)}$ meson (the same for η' while in $N_f = 3$ case).

The production rates of light hadrons in J/ψ radiative decay are the main focus of our study. The theoretical prediction of light hadron production rates together with that of the glueball predicted by LQCD will provide a more complete theoretical criterion for the experimental determination of the glueball state. We started by calculating the partial width of $J/\psi \rightarrow \gamma \eta_{(2)}$. $\eta_{(2)}$ is a stable particle in our ensemble and can be easily treated with in theory. On the other hand, we will investigate the physical mechanism that makes the production rate of η' so large in such a process. By applying the distillation method, we calculated a three-point correlation function containing an electromagnetic current, and obtained the on shell electromagnetic form factor $M(0) = 0.01051(61)$ GeV $^{-1}$. Assuming the dominance of the $U_A(1)$ anomaly in such decays, and taking the mixing angle between η and η' to be $\theta_{\text{lin}} = -24.5^\circ$, we predicted the production rates of η and η' mesons in J/ψ radiative decays to be $1.15(14) \times 10^{-3}$ and $4.49(53) \times 10^{-3}$, respectively. These are given by the LQCD calculation for the first time worldwide, and they agree with the experimental value $1.13(3) \times 10^{-3}$ and $5.25(7) \times 10^{-3}$ within errors. The result also confirms the dominance of the QCD $U_A(1)$ anomaly, as we assumed above. Our result demonstrates the promising potential for lattice QCD to investigate light hadron productions in the J/ψ radiative decay. We have also completed the calculation of the production rate of J/ψ radiatively decaying into $I^G J^{PC} = 0^+ 1^{-+}$ light hybrid η_1 .

We have also tried to investigate the production of light scalar meson in J/ψ radiative decay. However, scalar meson decay and multi-hadron final states such as $\pi\pi$ cannot be neglected, and we are trying to overcome these difficulties. We have used only

one ensemble in our studies, and there exists some uncontrolled system errors, such as SU(2) approximation, chiral extrapolation and continuum limit. These should be solved in the future.

Key Words: Lattice quantum chromodynamics, Light hadron, Glueball, J/ψ radiative decay

目 录

第 1 章 绪论	1
1.1 引言	1
1.2 格点 QCD 简介	3
1.2.1 欧氏时空的路径积分量子化	4
1.2.2 连续时空离散化	4
1.2.3 格点上的 QCD 作用量	5
1.2.4 Symanzik 与蝌蚪图改进的规范作用量	10
1.2.5 四叶草费米子作用量	12
1.3 各向异性的格点 QCD 作用量	14
1.3.1 各向异性的四叶草费米子作用量	14
1.3.2 各向异性的 Symanzik 改进的规范作用量	17
1.3.3 各向异性的蝌蚪图改进的 QCD 作用量	18
1.4 物理可观测量	19
1.4.1 夸克传播子和组态平均	19
1.4.2 夸克双线性型和两点关联函数	21
1.5 费米子矩阵的逆	24
1.5.1 源, 汇和传播子	24
1.5.2 涂摩和蒸馏方法	26
1.5.3 迭代求解器	29
1.5.4 奇偶预处理	32
1.6 误差分析	35
1.6.1 系统误差	35
1.6.2 统计误差	36
1.7 小结	37
第 2 章 $N_f = 2$ 格点 QCD 规范系综标定	39
2.1 格点配置	39
2.2 杂化 Monte Carlo	39
2.2.1 Markov 链 Monte Carlo	39
2.2.2 分子动力学	42
2.2.3 杂化 Monte Carlo 算法	43
2.3 介子算符构造	48
2.3.1 格点上的介子算符	48

2.3.2 味道单态介子关联函数构造	49
2.3.3 赝标量和矢量介子关联函数参数化	50
2.3.4 广义本征值问题	50
2.4 标定各向异性	53
2.4.1 介子色散关系	53
2.5 标定格距	54
2.5.1 时间方向格距	54
2.5.2 价粲夸克参数	56
2.6 自相关	57
2.6.1 积分自相关时间	57
2.6.2 分批平均	60
2.6.3 可观测量	61
2.7 QUDA 的 Python 接口	61
2.7.1 Chroma 程序输入参数	61
2.7.2 API 绑定	63
2.7.3 场顺序约定	63
2.7.4 MPI 多卡并行	64
2.7.5 四叶草项	65
2.7.6 求逆	65
2.7.7 HMC	66
2.7.8 半馏分传播子	66
2.7.9 本征向量作为序列源	67
2.8 小结	68
第 3 章 $N_f = 2$ 格点 QCD 中 $\eta_{(2)}$ 介子与胶球的混合	71
3.1 背景介绍	71
3.2 数值细节	72
3.2.1 算符构造和蒸馏方法	73
3.2.2 进一步标定 $\eta_{(2)}$ 质量	75
3.3 关于 $\eta_{(2)}$ -胶球混合	76
3.3.1 理论考虑	76
3.3.2 $\Gamma = \gamma_5$ 情形	77
3.3.3 $\Gamma = \gamma_4 \gamma_5$ 情形	82
3.4 关于 $\eta_{(2)}$ - η 关联函数	84
3.5 小结	85

第 4 章 $N_f = 2$ 格点 QCD 中 J/ψ 辐射衰变到 $\eta_{(2)}$ 的宽度	87
4.1 背景介绍	88
4.2 公式	88
4.3 数值细节	89
4.4 讨论	94
4.5 小结	95
第 5 章 总结和展望	97
参考文献	99
附录一 PyQuda 中的纯规范 HMC 实现	113
附录二 荐读书目	117
致谢	119
作者简历及攻读学位期间发表的学术论文与其他相关学术成果 ..	121

图目录

图 1-1	α_s 随能标 Q 的变化, 来自综述 [1]	2
图 1-2	格点 QCD 计算得到的强子谱, 来自综述 [1]	3
图 1-3	二维格点上的物质场和规范链接, 来自综述 [1]	6
图 1-4	格点上可能的路径长度小于 6 的 Wilson 圈, 来自综述 [2]	10
图 1-5	四叶草项示意图, 来自文章 [3]	12
图 1-6	二维情形的 APE 涂摩示意图, 来自综述 [2]	26
图 2-1	味道多重态和单态 Wick 收缩示意图, 来自综述 [2]	49
图 2-2	不同内插场算符求解 GEVP 得到的有效质量	52
图 2-3	π, η, ρ 的色散关系	53
图 2-4	使用 Wilson 流和质量平方差方法得到的格距 α_s 随夸克质量参数 m_0 的变化	55
图 2-5	$J/\psi, \eta_c$ 的色散关系	56
图 2-6	π 介子关联函数的积分自相关时间 $\tau_{\text{int}}(t_0)$ 随 t_0 的变化	59
图 2-7	π 介子关联函数的分批平均误差随批尺度的变化	59
图 2-8	π, η, η_c 介子和赝标量胶球关联函数的积分自相关时间和分批平均误差的变化	60
图 3-1	$\eta_{(2)}$ 在 $\Gamma = \gamma_5$ 时的关联函数	74
图 3-2	$\pi, \eta_{(2)}$ 在不同 Γ 时的有效质量	74
图 3-3	$\Gamma = \gamma_5$ 时 $\eta_{(2)}$ -胶球的关联函数 $C_{G\gamma_5}$	78
图 3-4	$C_{G\gamma_5}$ 的时间偏导数	80
图 3-5	赝标量胶球的有效质量	80
图 3-6	利用 t 奇函数性质折叠的 $C_{G\gamma_5}$	82
图 3-7	$\Gamma = \gamma_4\gamma_5$ 时 $\eta_{(2)}$ -胶球的关联函数 $C_{G(\gamma_4\gamma_5)}$	83
图 3-8	$C_{\Gamma\Gamma_c}$ 在不同 Γ, Γ_c 的有效质量	85
图 4-1	$\eta_{(2)}$ 的色散关系	90
图 4-2	$J/\psi \rightarrow \gamma\eta_{(2)}$ 过程的示意图	91
图 4-3	在 $t' = 40$ 时形状因子 $M(Q^2, t)$ 随 $t - t'$ 的变化	93
图 4-4	$M(Q^2)$ 随 Q^2 的变化	94

表目录

表 1-1	内插场 Γ 对应的夸克双线性型的量子数	21
表 2-1	规范系综参数	39

表 2-2	$\text{SO}(3)$ 到 \mathbf{O} 不可约表示 Λ 的分导表示	48
表 2-3	\mathbf{O} 不可约表示的基	48
表 2-4	不同组分夸克的赝标量介子和矢量介子的质量实验值	54
表 2-5	$J/\psi, \eta_c, D, D^*$ 的质量	57
表 3-1	从系综上计算的关联函数中拟合得到的基态质量和混合角	81
表 4-1	无量纲的在壳形状因子 $V(0)$ 在不同 J/ψ 辐射衰变赝标量末态的 实验值	88
表 4-2	规范系综参数	89
表 4-3	$E_{\eta_{(2)}}$, Q^2 和 $M(Q^2)$ 在不同动量模式 \vec{n}_p 下的拟合值	93

符号列表

字符

Symbol	Description	Unit
α	QED fine-structure constant	1
$\alpha_s = \frac{g^2}{4\pi}$	QCD coupling constant	1
δ_{ij}	Kronecker delta	1
$\epsilon_{ijk\dots}$	Levi-Civita symbol	1

算子

Symbol	Description
∂	derivative
D	covariant derivative
$\Delta^{(*)}$	forward(backward) difference
$\nabla^{(*)}$	covariant forward(backward) difference
∇^2	Laplacian operator on the lattice
\mathcal{O}	hadron/current operator
$\langle \cdot \rangle$	average by configurations

缩写

QCD	Quantum Chromodynamics
QED	Quantum Electrodynamics
MPI	Message Passing Interface
SW	Sheikholeslami-Wohlert
CG	Conjugate Gradient
MCMC	Markov Chain Monte Carlo
HMC	Hybrid Monte Carlo
GEVP	General Eigenvalue Problem
PDG	Review of Particle Physics by Particle Data Group
WV	Witten-Veneziano
LH	Laplacian Heaviside
GMO	Gell-Mann Okubo

第 1 章 绪论

1.1 引言

粒子物理的标准模型是用于描述四种基本相互作用之三（电磁，弱，强——引力除外）的理论，由描述强相互作用的量子色动力学（quantum chromodynamics, QCD）和描述电磁和弱相互作用的电弱统一理论组成，相应的规范对称群为 $SU(3) \times SU(2) \times U(1)$ 。其中的电弱统一理论规范群为 $SU(2) \times U(1)$ ，有对应于 $SU(2)$ 的规范玻色子 W_μ^i , $i = 1, 2, 3$ 和对应于 $U(1)$ 的 B_μ 。QCD 则是其中的 $SU(3)$ 部分，描述了带颜色自由度的胶子和夸克之间的强相互作用。

关于强相互作用的研究可以追溯到 20 世纪 50 年代，随着当时实验技术的进步，越来越多的强子被发现，如此之多的强子显然不能被认为是基本的粒子。1961 年，Murray Gell-Mann^[4] 和 Yuval Ne'eman^[5] 提出了八正法来归类这些强子。Gell-Mann^[6] 和 George Zweig^[7-8] 后来在 1964 提出这样的结构可以被解释为强子内部存在更小的，有三种味道的粒子，可以构成相应的 $SU(3)$ 对称性，这些粒子被 Gell-Mann 称为夸克（quark）。后来的研究中，人们认为夸克中还应当有额外的自由度，1964~1965 年，O. W. Greenberg^[9] 以及 M. Y. Han 和 Yoichiro Nambu^[10] 引入了一个额外的 $SU(3)$ 规范自由度，这在后来被称为颜色（color）。1973 年，H. Fritzsch, Gell-Mann 和 H. Leutwyler^[11] 基于颜色作为强相互作用规范场的假设和 Yang-Mills 理论^[12]，提出了 QCD，其 Lagrangian 定义为

$$\mathcal{L} = \sum_q \bar{\psi}_{q,b} (i\gamma^\mu D_\mu - m_q) \psi_{q,b} - \frac{1}{4} F_{\mu\nu}^a F^{a,\mu\nu}, \quad (1-1)$$

重复指标默认求和。 γ^μ 是 Dirac γ 矩阵， D_μ 是规范场下的协变导数， $\psi_{q,a}$ 是带味道 q 的夸克场旋量，质量为 m_q ，夸克颜色指标 b 从 1 取到 $N_c = 3$ ，规范场颜色指标 a 从 1 取到 $N_c^2 - 1 = 8$ ，场强张量 $F_{\mu\nu}^a = \partial_\mu A_\nu^a - \partial_\nu A_\mu^a + g f^{abc} A_\mu^b A_\nu^c$ 。同年，基于 Gerard 't Hooft 和 M. J. G. Veltman 关于非 Abelian 规范理论的重整化的工作^[13]，David J. Gross 和 Frank Wilczek^[14] 以及 H. David Politzer^[15] 分别独立地发现了夸克和胶子之间相互作用渐近自由的特性。随后 Kenneth G. Wilson 在 1974 年在数值上理解了颜色禁闭的问题^[16]，至此关于强相互作用的理论出现了一致的图景。在能量相较于典型的 QCD 能标 $\Lambda_{\text{QCD}} \sim 250 \text{ MeV}$ 较大时，相互作用耦合强度较弱，夸克和无质量的胶子可以被认为理论的基本自由度。但在低能量下求解 QCD 系统是非常困难的，因为此时它是一个强耦合理论，需要从第一性原理出发对 QCD 进行研究。

在微扰 QCD 的框架中，对可观测量的预测是以重整化的耦合 $\alpha_s(\mu_R^2)$ 来表示的，它是一个（非物理的）重整化标度 μ_R 的函数，与耦合常数 g 有关系 $\alpha_s = \frac{g^2}{4\pi}$ 。当我们令 μ_R 接近于某个过程中动量转移 Q 时，那么 $\alpha_s(\mu_R^2 \approx Q^2)$ 就表示了该过

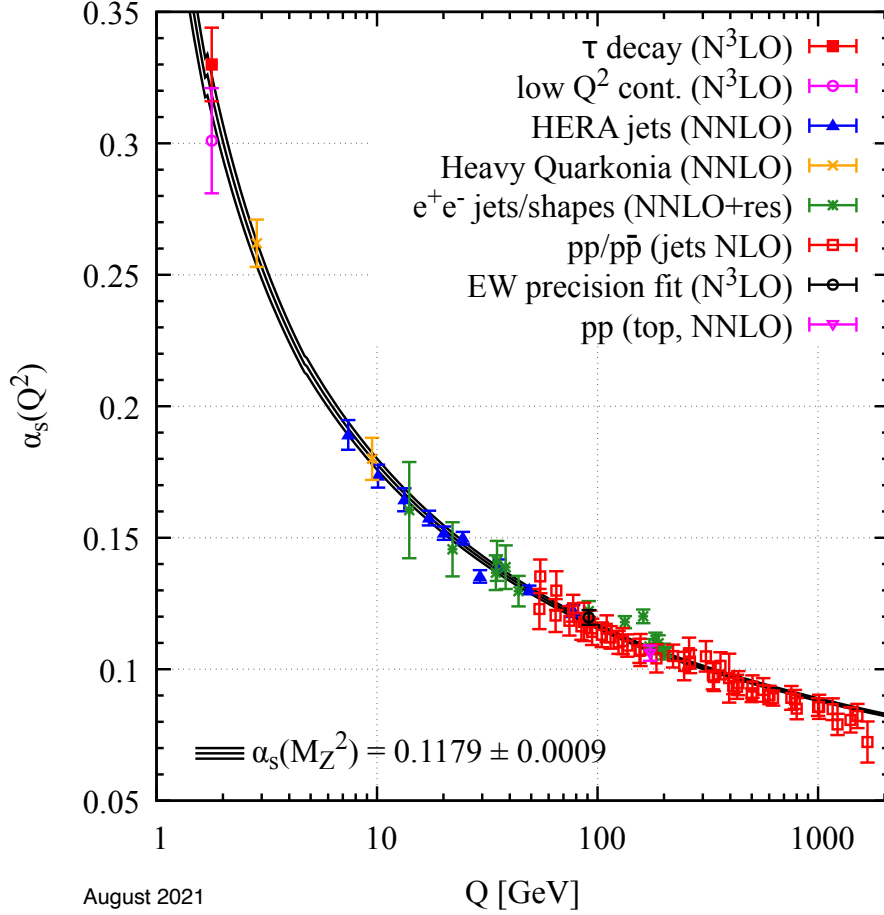

 图 1-1 α_s 随能标 Q 的变化，来自综述 [1]

 Figure 1-1 Summary of measurements of α_s as a function of the energy scale Q .

程中强相互作用的有效强度^[1]。在单圈水平上，耦合满足

$$\mu_R^2 \frac{d\alpha_s}{d\mu_R^2} = \beta(\alpha_s) = -b_0\alpha_s^2 + \mathcal{O}(\alpha_s^4). \quad (1-2)$$

$b_0 = \frac{33-2N_f}{12\pi}$ ， N_f 是理论中夸克的味道数。忽略高阶项，可以求解得到

$$d\frac{1}{\alpha_s} = b_0 d\ln(\mu_R^2), \implies \alpha_s = \frac{1}{b_0 \ln\left(\frac{\mu_R^2}{\Lambda^2}\right)}. \quad (1-3)$$

这里 Λ 是积分常数，一般取上文提到的 Λ_{QCD} 。显然，当能标 μ_R^2 降低时， α_s 会变得非常大，导致之前忽略高阶项的结果不可信，亦即微扰展开在此失效。这种耦合随着能标变化的性质被称为跑动耦合常数，粒子数据组（Particle Data Group, PDG）^[1] 综合了现有的实验数据，对 α_s 随能标跑动的行为总结如图 1-1，图中对于低能标时耦合 α_s 的快速增长有直观的描述。

因此，在微扰展开失效的能标区间，例如计算轻强子谱时，需要一种能够非微扰地处理 QCD 的手段。格点量子色动力学（lattice quantum chromodynamics, Lattice QCD）就是这样一种从第一性原理出发，可以非微扰地对 QCD 系统进行

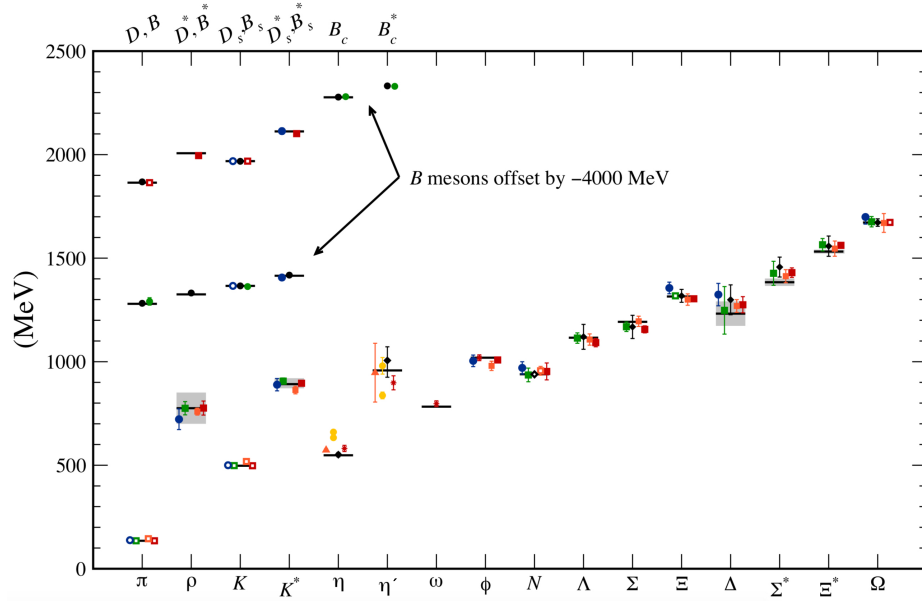


图 1-2 格点 QCD 计算得到的强子谱，来自综述 [1]

Figure 1-2 Hadron spectrum from lattice QCD, from review [1]. Refer to the *Quark Model* review for the meanings of different symbols.

求解的方法，通过格点 QCD 进行的强子谱计算已经在国际上被广泛认可，在来自综述 [1] 的图 1-2 中，可以看到各大格点合作组确定的强子谱基本都与实验相符。除此之外，格点 QCD 在其他方向也有着重要贡献，包括确定轻夸克质量，衰变常数和形状因子，CKM 矩阵元，强耦合参数 α_s ，核子矩阵元等等[1, 17]。

1.2 格点 QCD 简介

1974 年，Kenneth G. Wilson 在他著名的论文《夸克禁闭》（Confinement of quarks）中提出了格点规范理论[16]。文章中，Wilson 在离散化的欧氏时空中给出了一种像 QCD 这样的矢量规范场理论的非微扰定义，并利用它来理解 QCD 中夸克禁闭的问题。在理论上，格点的有限格距自然地引入了一个紫外截断，处理了连续理论中紫外发散的问题。相应的，连续理论则通过采取格点间距消失的极限来恢复。格点 QCD 的定义不依赖于微扰展开，而是通过定义理论的路径积分并在数值上估计它以完成非微扰的计算。Wilson 本人并没有在计算机上进行实际的数值模拟，而是通过强耦合展开来进行他的论述。20 世纪 80 年代开始，M. Creutz 实现了一系列规范场的 Monte Carlo 数值模拟[18-22]，拓宽了格点规范理论的应用领域。在这一阶段，只有规范场被纳入考量而费米子（海夸克）的贡献被完全忽略，这也被称为淬火近似（quenched approximation）。之后随着杂化 Monte Carlo 算法[23] 的提出，模拟海夸克贡献变得可能，与淬火近似对应，后来发展的非淬火格点 QCD 被称为完整（full）格点 QCD，也称动力学（dynamic）格点 QCD。

1.2.1 欧氏时空的路径积分量子化

路径积分量子化是对于非阿贝尔规范理论的可行的量子化方案，也是格点场论采用的量子化方案。闵氏时空下，对于一个包含费米子场 $\bar{\psi}$, ψ 与胶子场 A 的 QCD 理论，生成泛函（配分函数）由下面的积分式给出：

$$\mathcal{Z}[A, \bar{\psi}, \psi] = \int \mathcal{D}A \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{iS}, \quad (1-4)$$

其中作用量 $S = \int d^4x \mathcal{L}[A, \bar{\psi}, \psi]$ 是对拉氏密度的时空积分。则物理可观测量由下式给出：

$$\langle \mathcal{O}_1 \dots \mathcal{O}_n \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \int \mathcal{D}A \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \mathcal{O}_1 \dots \mathcal{O}_n e^{iS}. \quad (1-5)$$

我们需要将上式通过 Wick 转动^[24] 推广到欧氏时空。具体来说，

$$\begin{aligned} t &\rightarrow it = x_4, \\ E &\rightarrow iE = p_4, \\ \gamma_i &\rightarrow i\gamma_i. \end{aligned} \quad (1-6)$$

则欧氏时空中的泛函积分为

$$\mathcal{Z}[A, \bar{\psi}, \psi] = \int \mathcal{D}A \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-S_E}. \quad (1-7)$$

此时， e^{-S_E} 因子可以类比 Boltzmann 分布中的概率分布因子，作用量 S_E 是在欧氏时空中的形式，从而可以使用统计物理的手段对 QCD 系统进行研究。在下文中，若无特殊说明，我们将在欧氏时空中考虑所有的理论，例如 S_E 中指示欧氏时空的下标将不再特别标出。

特别的，在应用了 Wick 转动后，自由费米子场的 Dirac 作用量

$$\mathcal{L} = \bar{\psi} (i\gamma^\mu D_\mu - m_0) \psi \quad (1-8)$$

将会变为

$$\mathcal{L} = -\bar{\psi} (\gamma_\mu D_\mu + m_0) \psi. \quad (1-9)$$

1.2.2 连续时空离散化

上述泛函积分 (1-7) 在连续时空中的计算仍然是困难的。Wilson 提出^[16] 使用连续时空离散化方案，将连续的四维欧氏时空离散化为一个四维超立方格子，即某个方向的坐标 $x_\mu = n_\mu a$, $n_\mu \in \mathbb{N}$ 是格子两点之间的距离 a 的整数倍，也称 a 为格距。在这样的格子上，场变量需要进行重新定义。一般而言，物质场，如夸克场，被定义在这些离散的点（格位，site）上，即 $\psi(x)$ 。如果要求费米场仍保持连续时空中的规范变换性质

$$\begin{aligned} \psi(x) &\rightarrow V(x)\psi(x), \\ \bar{\psi}(x) &\rightarrow \bar{\psi}(x)V^\dagger(x). \end{aligned} \quad (1-10)$$

其中 $V(x)$ 是一个规范变换。显然不同位置的场之间的差值 $\psi(x) - \psi(y)$ 是规范依赖的，这样无法定义差分和导数。在连续情形下，我们为了保证规范对称性，需要引入由规范场 $A_\mu(x)$ 定义的、有如下规范变换性质的平行移动算子 $U(x, y; \mathcal{C})$ ：

$$U(x, y; \mathcal{C}) \equiv \mathcal{P}e^{\int_{x, \mathcal{C}}^y igA_\mu(x)dx_\mu} \rightarrow V(x)U(x, y; \mathcal{C})V^\dagger(y). \quad (1-11)$$

这样，我们可以定义费米子场 ψ 的差分：

$$\Delta\psi(x) = \psi(x) - U(x, y; \mathcal{C})\psi(y) \quad (1-12)$$

这样就保证了在局域规范变换下， $\Delta\psi(x)$ 和 $\psi(x)$ 的变换性质相同，即规范协变。在格点上，一个最短的平行移动算子沿连接相邻两个格位的线段移动，即

$$U_\mu(x) \equiv U(x, x + \mu) = e^{\int_x^{x+a\hat{\mu}} dx_\mu igA_\mu(x)}. \quad (1-13)$$

这里， $\hat{\mu}$ 表示沿 μ 方向的单位向量，而且在格距 $a \rightarrow 0$ 的条件下略去了沿路径积分的符号。 $U_\mu(x)$ 通常称为规范链接（gauge link），是格点上的基本的规范场变量。另外显然的，

$$U_{-\mu}(x) \equiv U(x, x - \mu) = U^\dagger(x - \mu, x) = U_\mu^\dagger(x - \mu), \quad (1-14)$$

这意味着实践中只需要存储正方向的规范链接即可。我们通常令

$$U_\mu(x) = e^{ia g A_\mu(x)}, \quad (1-15)$$

即使用 $aA_\mu(x)$ 替代 $\int_x^{x+\mu} dx_\mu A_\mu(x)$ 。在一个格点上，某个规范场对应的所有 U_μ 被称为规范组态。显然，组态并不是唯一的，每个格位上的每个方向的规范链接原则上可以取 $SU(3)$ 群上的任意值，但满足规范变换性质

$$U_\mu(x) \rightarrow V(x)U_\mu(x)V^\dagger(x + \mu). \quad (1-16)$$

对于 QCD，其规范群 $SU(3)$ ，所以有 $V(x) \in SU(3)$ 。

来自综述 [1] 的图 1-3 直观展示了一个二维格点平面上的物质场 q, \bar{q} 和规范链接 U_μ ，以及格距 a 的含义。

1.2.3 格点上的 QCD 作用量

现在我们来构造格点上的作用量。作用量是规范不变的，因此可以通过规范不变量来进行构造。有两种简单的形式容易被证明是规范不变的：首先由闭合路径上的规范链接依次相乘后取迹得到的结果是规范不变的，我们称之为 Wilson 圈（Wilson loop），

$$\begin{aligned} & \text{Tr}[U_{\mu_1}(x)U_{\mu_2}(x + \mu_1) \dots U_{\mu_N}(x - \mu_N)] \\ & \rightarrow \text{Tr}[V(x)U_{\mu_1}(x)U_{\mu_2}(x + \mu_1) \dots U_{\mu_N}(x - \mu_N)V^\dagger(x)] \\ & = \text{Tr}[V^\dagger(x)V(x)U_{\mu_1}(x)U_{\mu_2}(x + \mu_1) \dots U_{\mu_N}(x - \mu_N)] \\ & = \text{Tr}[U_{\mu_1}(x)U_{\mu_2}(x + \mu_1) \dots U_{\mu_N}(x - \mu_N)]; \end{aligned} \quad (1-17)$$

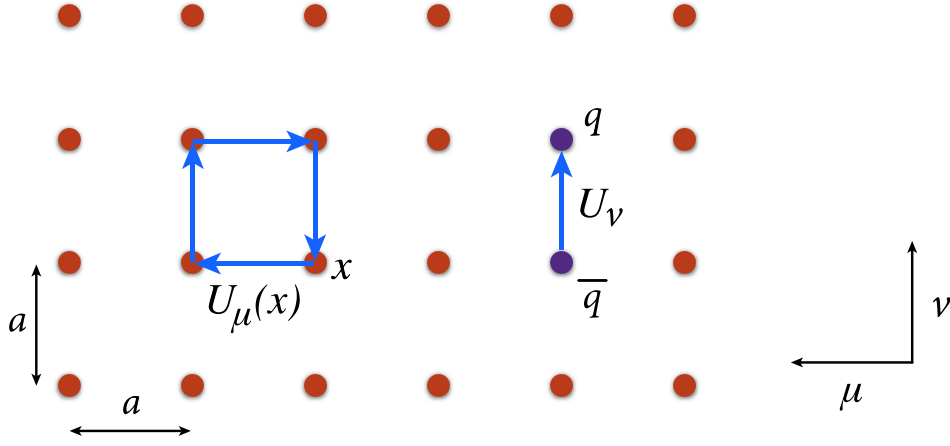


图 1-3 二维格点上的物质场和规范链接，来自综述 [1]

Figure 1-3 Matter fields and gauge links on a 2-dimensional lattice. The figure also shows the meaning of lattice spacing a .

其次，由规范链接连接的两个不同位置的物质场也是规范不变的，

$$\begin{aligned} & \bar{\psi}(x)U_{\mu_1}(x)\dots U_{\mu_N}(y-\mu_N)\psi(y) \\ \rightarrow & \bar{\psi}(x)V^\dagger(x)V(x)U_{\mu_1}(x)U_{\mu_2}(x+\mu_1)\dots U_{\mu_N}V^\dagger(y)V(y)(y-\mu_N) \\ = & \bar{\psi}(x)U_{\mu_1}(x)U_{\mu_2}(x+\mu_1)\dots U_{\mu_N}(y-\mu_N). \end{aligned} \quad (1-18)$$

以上公式使用了规范变换 $V \in \text{SU}(3)$ 的性质。除了规范不变的性质以外，还需要注意在格点上，作用量形式在连续极限（格距 $a \rightarrow 0$ ）的情况下应该回到连续场论的作用量形式。

Wilson 提出可以使用 1×1 的 Wilson 圈（小方格，plaquette）作为格点上的规范场作用量，这也被称为小方格作用量，

$$S_g = \frac{2}{g^2} \sum_x \sum_{\mu < \nu} \text{ReTr} [1 - W_{\mu\nu}^{1 \times 1}(x)]. \quad (1-19)$$

其中 $W_{\mu\nu}^{1 \times 1}(x) = U_\mu(x)U_\nu(x+\mu)U_\mu^\dagger(x+\nu)U_\nu^\dagger(x)$ 。在格距很小的情形下有近似展开：

$$U_\mu(x+\nu) = e^{iagA_\mu(x+\nu)} = e^{iag[A_\mu(x)+a\partial_\nu A_\mu + \mathcal{O}(a^2)]}. \quad (1-20)$$

利用公式 $e^A e^B = e^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]+\dots}$ ，将小方格作用量展开到 $\mathcal{O}(a^2)$ ，

$$W_{\mu\nu}^{1 \times 1} = e^{ia^2 g \{\partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu + ig[A_\mu, A_\nu]\} + \mathcal{O}(a^3)} = e^{ia^2 g F_{\mu\nu} + \mathcal{O}(a^3)}. \quad (1-21)$$

则在 $a \rightarrow 0$ 时,

$$\begin{aligned}
 & \lim_{a \rightarrow 0} \frac{2}{g^2} \sum_x \sum_{\mu < \nu} \text{ReTr} (1 - W_{\mu\nu}^{1 \times 1}) \\
 & \approx \lim_{a \rightarrow 0} - \sum_x \frac{1}{2} \sum_{\mu, \nu} \text{ReTr} \left[a^4 F_{\mu\nu} F_{\mu\nu} - 2i \frac{a^2}{g} F_{\mu\nu} + \mathcal{O}(a^3) + \mathcal{O}(a^5) + \mathcal{O}(a^6) \right] \\
 & = \lim_{a \rightarrow 0} - \frac{1}{2} a^4 \left[\sum_x \sum_{\mu, \nu} \text{Tr} F_{\mu\nu} F_{\mu\nu} + \mathcal{O}(a^2) \right] \\
 & = - \frac{1}{2} \int d^4x \sum_{\mu, \nu} \text{Tr} F_{\mu\nu} F_{\mu\nu} = - \frac{1}{4} \int d^4x \sum_{a, \mu, \nu} F_{\mu\nu}^a F_{\mu\nu}^a.
 \end{aligned} \tag{1-22}$$

其中 $F_{\mu\nu}$ 一次项由于带有虚数单位在取实部时被消去; a 的奇次项由于带有 A_μ 的奇次项, 在取迹时被消去; 第二行的 $\frac{1}{2}$ 来自于 $\mu < \nu$ 到所有 μ, ν 的变化; 最后一行应用了 $\mathfrak{su}(3)$ 李代数生成元的性质 $\text{Tr}(T^a T^b) = \frac{1}{2} \delta^{ab}$ 。这一项正是欧氏时空中自由 QCD 作用量的场强张量的贡献。注意到, 在第三行仍然有一个 $\mathcal{O}(a^2)$ 的额外项, 我们称这样的作用量为 $\mathcal{O}(a^2)$ 的。在后续的 1.2.4 小节我们将讨论如何将此处额外项推到更高阶。

我们接着构造格点上的费米子作用量。在连续四维欧氏时空的场论中, 有 Dirac 作用量

$$S = \int d^4x \bar{\psi} (\gamma_\mu D_\mu + m_0) \psi, \tag{1-23}$$

其中 γ_μ 是欧氏时空中的 Dirac 矩阵。这些矩阵可以有不同的具体形式, 由于实现上的考量, 我们通常选用 DeGrand-Rossi 基, 它是一种手征基底, 同时它也是 USQCD 软件套装 Chroma/QDPXX^[25] 选用的默认基底。其具体形式如下:

$$\begin{aligned}
 \gamma_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \gamma_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\
 \gamma_3 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \gamma_4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{1-24}$$

通常, $\gamma_{1,2,3}$ 代表三个空间方向, γ_4 代表时间方向, $\gamma_5 = \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 \gamma_4$ 。现在使用最朴素的分立格点差分形式替换掉 Dirac 作用量中的偏导数项, 我们得到了一个格点上的费米子作用量:

$$S[\bar{\psi}, \psi] = a^4 \sum_x \bar{\psi}_x \left[\frac{1}{2} (\Delta_\mu + \Delta_\mu^*) \gamma_\mu + m_0 \right] \psi_x, \tag{1-25}$$

其中 Δ_μ 和 Δ_μ^* 是定义在格点上的向前和向前一阶差分算符,

$$\begin{cases} \Delta_\mu \psi_x = \frac{1}{a} (\psi_{x+\mu} - \psi_x), \\ \Delta_\mu^* \psi_x = \frac{1}{a} (\psi_x - \psi_{x-\mu}). \end{cases} \tag{1-26}$$

在格点场论中，费米子作用量通常被写成双线性型，

$$S[\bar{\psi}, \psi] = a^4 \sum_{x,y} \bar{\psi}_x \mathcal{M}_{xy} \psi_y, \quad (1-27)$$

我们称矩阵 \mathcal{M} 为费米子矩阵。不难证明费米子矩阵有性质

$$\gamma_5 \mathcal{M} \gamma_5 = \mathcal{M}^\dagger, \quad (1-28)$$

被称为 γ_5 -Hermiticity。

公式 (1-25) 定义了格点上最简单的费米子作用量，一般叫做天真 (naive) 费米子作用量。我们对其进行路径积分得到配分函数，

$$Z = \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-S[\bar{\psi}, \psi]}. \quad (1-29)$$

为了方便对指数配方进行计算，通常可以引入外源场 J 和 \bar{J} ，使得配分函数变为关于外源的函数，

$$\mathcal{Z}[\bar{J}, J] = \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-S[\bar{\psi}, \psi] + (\bar{J}_x \psi_x + \bar{\psi}_x J_x)} = e^{a^{-4} \bar{J}_x \mathcal{M}_{xy}^{-1} J_y} \mathcal{Z}[0, 0]. \quad (1-30)$$

通过对外源场的合适微商，可以得到所有的场编时 Green 函数。例如

$$\langle T[\psi_x \bar{\psi}_y] \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}[\bar{J}, J]} \frac{\delta^2 \mathcal{Z}[\bar{J}, J]}{\delta \bar{J}_x \delta J_y} \Big|_{\bar{J}, J=0} = a^{-4} \mathcal{M}_{xy}^{-1}. \quad (1-31)$$

费米子传播子和费米子矩阵被联系在了一起。写出费米子矩阵 \mathcal{M} 的具体形式，

$$\mathcal{M}_{xy} = \frac{1}{2a} (\delta_{x+\mu, y} - \delta_{x-\mu, y}) \gamma_\mu + \delta_{x, y} m_0, \quad (1-32)$$

通过 Fourier 变换将 \mathcal{M} 转换到动量空间，

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{M}}_{pk} &= \sum_x e^{-ipx} \left\{ \frac{1}{2a} [e^{-ik(x+\mu)} - e^{-ik(x-\mu)}] \gamma_\mu + e^{-ikx} m_0 \right\} \\ &= \sum_x e^{-ipx} e^{-ikx} \left\{ \frac{1}{2a} [e^{-ik\mu} - e^{ik\mu}] \gamma_\mu + m_0 \right\} \\ &= \delta_{p, -k} \left[\frac{-i\gamma_\mu \sin(ak_\mu)}{a} + m_0 \right]. \end{aligned} \quad (1-33)$$

这里我们采用了格点上的离散 Fourier 变换形式， p 和 k 的取值为 $\frac{2\pi n}{aL_\mu}$ ， $n \in \{0, 1, \dots, L_\mu - 1\}$ ，其中 L_μ 为 μ 方向上格点的数量。取逆后变换回位形空间：

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{xy}^{-1} &= \frac{1}{V} \sum_p e^{ip(x-y)} \left[\frac{i\gamma_\mu \sin(p_\mu a)}{a} + m_0 \right]^{-1} \\ &= \frac{1}{V} \sum_p \frac{ae^{ip(x-y)}}{i\gamma_\mu \sin(p_\mu a) + m_0 a}. \end{aligned} \quad (1-34)$$

在连续极限 $a \rightarrow 0$ 条件下,

$$\lim_{a \rightarrow 0} \langle \psi_x \bar{\psi}_y \rangle = \frac{1}{a^4 V} \sum_p \frac{e^{ip(x-y)}}{i\gamma_\mu p_\mu + m_0}, \quad (1-35)$$

即为连续欧氏空间的传播子。但是, 注意到式 (1-34) 有多于一个极点, 这意味着天真费米子作用量会让我们会同时看到许多粒子存在, 但这不是真实的物理结果。不妨考虑无质量的费米子, 即 $m_0 = 0$, 通过简单的计算可以得到:

$$\sin(p_\mu a) = 0, \text{ when } p_\mu = 0, \pi. \quad (1-36)$$

即在四维欧氏时空中总共会产生 16 个粒子, 除了 $(0,0,0,0)$ 动量以外, 其他都是非物理的粒子。这些多余的粒子被称为加倍子 (doubler), 这个问题通常也叫费米子加倍问题。

为了解决加倍问题, Wilson 提出^[26] 将动量空间的费米子传播子倒数修改为:

$$-i\gamma_\mu \frac{\sin(p_\mu a)}{a} + m_0 \rightarrow -i\gamma_\mu \frac{\sin(p_\mu a)}{a} + \frac{r}{a} [1 - \cos(p_\mu a)] + m_0. \quad (1-37)$$

其中 r 被称为 Wilson 系数, 通常取 1。不难发现, 这一项的加入等效使得加倍子质量提高了 $1/a$ 的量级。随着趋近于连续极限, 加倍子将会与物理粒子解耦, 并被截断, 最终使得在连续极限下费米子作用量只产生一个物理粒子, 这正是我们想要的。回到位形空间, 其作用相当于在 Dirac 作用量中加入一个量纲为 5 的二阶偏导数算符:

$$S[\bar{\psi}, \psi] = a^4 \sum_x \bar{\psi}_x \left[\frac{1}{2} (\nabla_\mu + \nabla_\mu^*) \gamma_\mu - \frac{ar}{2} \nabla_\mu^* \nabla_\mu + m_0 \right] \psi_x. \quad (1-38)$$

对于天真费米子作用量, 在连续极限下通过求解动量空间传播子极点, 得到相应的色散关系 (dispersion relation),

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_\mu \frac{\sin^2(k_\mu a)}{a^2} + m_0^2 = \sum_\mu k_\mu^2 + \mathcal{O}(a^2) + m_0^2, \\ E^2 &= -k_4^2 = \sum_i k_i^2 + m_0^2 + \mathcal{O}(a^2). \end{aligned} \quad (1-39)$$

但是对于 Wilson 作用量费米子, 做同样的展开:

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_\mu \frac{\sin^2(k_\mu a)}{a^2} + \left[\frac{2}{a} \sin^2 \left(\frac{k_\mu a}{2} \right) + m_0 \right]^2 \\ &= \sum_\mu k_\mu^2 + \left[\sum_\mu \frac{k_\mu^2 a}{2} + m_0 \right]^2 + \mathcal{O}(a^3) \\ &= \sum_\mu (1 + m_0 a) k_\mu^2 + m_0^2 + \mathcal{O}(a^2), \end{aligned} \quad (1-40)$$

$$E^2 = -k_4^2 = \sum_i k_i^2 + \frac{m_0^2}{1 + m_0 a} + \mathcal{O}(a^2) = \sum_i k_i^2 + m_0^2 + \mathcal{O}(a). \quad (1-41)$$

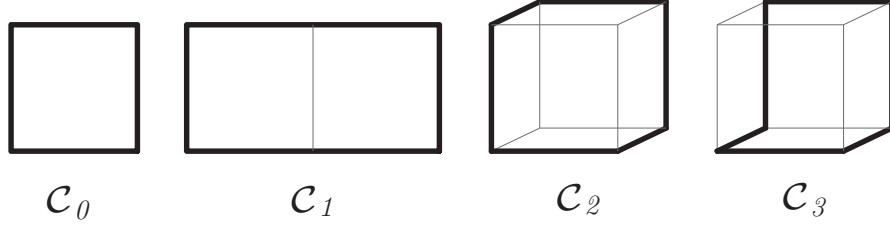


图 1-4 格点上可能的路径长度小于 6 的 Wilson 圈，来自综述 [2]

Figure 1-4 The possible Wilson loops with path length less than 6 on the lattice. The label C_i indicates the different path sets described in text.

显然，Wilson 作用量的色散关系与连续形式的偏移是 $\mathcal{O}(a)$ 的，而非天真费米子作用量的 $\mathcal{O}(a^2)$ ，我们将在之后的 1.2.5 小节尝试改进这一偏移。

注意到，在定义了格点规范场的情形下，简单的差分算符是规范变的。因此我们需要仿照连续规范理论中的协变导数定义将差分算符修改为协变差分算符，

$$\begin{cases} \nabla_\mu \psi(x) = \frac{1}{a} [U_\mu(x) \psi(x + \mu) - \psi(x)], \\ \nabla_\mu^* \psi(x) = \frac{1}{a} [\psi(x) - U_\mu^\dagger(x - \mu) \psi(x - \mu)]. \end{cases} \quad (1-42)$$

结合本节的内容，现在我们得到了一个最简单的格点上的 QCD 作用量：

$$S_{\text{LQCD}}[U_\mu, \bar{\psi}, \psi] = S_g[U_\mu] + a^4 \bar{\psi} \mathcal{M}[U_\mu] \psi, \quad (1-43)$$

其中 $S_g[U_\mu]$ 为小方格作用量 (1-19)，费米子矩阵 $\mathcal{M}[U_\mu]$ 为

$$\mathcal{M}[U_\mu]_{xy} = \frac{m_0 a + 4}{a} \delta_{x,y} - \frac{1}{2a} \sum_{\mu=1}^4 [(1 - \gamma_\mu) U_\mu(x) \delta_{x+\mu,y} + (1 + \gamma_\mu) U_\mu^\dagger(x - \mu) \delta_{x-\mu,y}]. \quad (1-44)$$

通常取 $\kappa = \frac{1}{2(m_0 a + 4)}$ ，并使用令对角项为单位矩阵的归一化方案：

$$2\kappa a \mathcal{M}[U_\mu]_{xy} = \delta_{x,y} - \kappa \sum_{\mu=1}^4 [(1 - \gamma_\mu) U_\mu(x) \delta_{x+\mu,y} + (1 + \gamma_\mu) U_\mu^\dagger(x - \mu) \delta_{x-\mu,y}] \quad (1-45)$$

1.2.4 Symanzik 与蝌蚪图改进的规范作用量

根据类似于 K. Symanzik 在标量格点场论中的分析^[27]，P. Weisz 提出^[28] 格点中规范作用量 $\mathcal{O}(a^2)$ 的紫外截断效应领头阶可以通过向小方格作用量中添加一些路径长度为 6 的 Wilson 圈消去，那么这样的作用量中出现的所有 Wilson 圈形状见图 1-4，总共有 4 种类型。对于某个格点而言，如图中的标记所示，所有

同类型路径的集合被定义为 \mathcal{C}_i 。M. Lüscher 和 P. Weisz 将这些 Wilson 圈添加到小方格作用量中^[29],

$$S_g(U_\mu) = \frac{2}{g^2} \sum_{i=0}^3 c_i \sum_{\mathcal{P} \in \mathcal{C}_i} \text{ReTr} [1 - W(\mathcal{P})]. \quad (1-46)$$

$W(\mathcal{P})$ 是闭合路径 \mathcal{P} 上的规范链接依次相乘的结果, 按照 (1-17) 的定义, 相应的 Wilson 圈就是 $\text{Tr}[W(\mathcal{P})]$ 。作用量可以按照 i 划分为四项, 通过对每一项进行小量展开, 保证领头阶为 $-\frac{1}{4}\text{Tr}(F_{\mu\nu}F_{\mu\nu})$ 可以得到系数关系

$$c_0 + 8c_1 + 8c_2 + 16c_3 = 1. \quad (1-47)$$

通过消除次领头阶贡献即 $\mathcal{O}(a^2)$ 项, 可以推导出额外的关系

$$\begin{aligned} c_0 + 20c_1 &= 0, \quad c_2 = c_3 = 0; \\ \Rightarrow c_0 &= \frac{5}{3}, \quad c_1 = -\frac{1}{12}, \quad c_2 = 0, \quad c_3 = 0. \end{aligned} \quad (1-48)$$

这样, 我们只需要额外计算 2×1 矩形的 Wilson 圈项, 就可以得到所谓的树图阶 Symanzik 改进的格点规范作用量,

$$\begin{aligned} S_g(U_\mu) &= \frac{2}{g^2} \sum_x \sum_{\mu < \nu} \left[\frac{5}{3} P_{\mu\nu}(x) - \frac{1}{12} R_{\mu\nu}(x) - \frac{1}{12} R_{\nu\mu}(x) \right], \text{ where} \\ P_{\mu\nu}(x) &= \text{ReTr} [1 - W_{\mu\nu}^{1 \times 1}(x)], \quad R_{\mu\nu}(x) = \text{ReTr} [1 - W_{\mu\nu}^{2 \times 1}(x)]. \end{aligned} \quad (1-49)$$

其中 $W_{\mu\nu}$ 的上标指示了该 Wilson 圈在对应方向上的形状。

事实上, 除了我们希望引入的 $\mathcal{O}(a^2)$ 项, 这些额外的修正项还带着 $\mathcal{O}(a^2 g^2)$ 项。为了消除这些贡献, Lüscher 和 Weisz 在两个维度被扭曲的情形下 (这时胶子是有质量的) 讨论了一些在壳量的解析计算结果^[30], 通过将系数设置为

$$c_0 = \frac{5}{3} + 0.237g^2, \quad c_1 = -\frac{1}{12} - 0.02521g^2, \quad c_2 = -0.00441g^2, \quad c_3 = 0, \quad (1-50)$$

将作用量的偏离提高到了 $\mathcal{O}(g^4 a^2)$, 这组系数也称为单圈水平的改进系数。这些系数确定方式并不是唯一的, 例如 Y. Iwasaki 还通过重整化群方法获得了一组系数^[31]。

G. P. Lepage 和 P. B. Mackenzie 注意到^[32], 当趋近连续极限时, 有对规范链接的展开

$$U_\mu(x) \approx 1 + iagA_\mu(x) + \mathcal{O}(a^2), \quad (1-51)$$

看起来更高阶的项被 $\mathcal{O}(a^2)$ 压低了, 但这是一个有误导性的结果。 A_μ^2 项给出的蝌蚪图将会产生 $\mathcal{O}(\frac{1}{a^2})$ 的紫外发散, 正好消除了所有高阶的 a 指数压低, 使得高阶项实际上只被 g^2 压低, 这并不是一个很小的值。考虑到在连续极限下, $1 + iagA_\mu(x)$ 的真空期望就是 1, 但是由于蝌蚪图修正效应, 格点上的规范链接

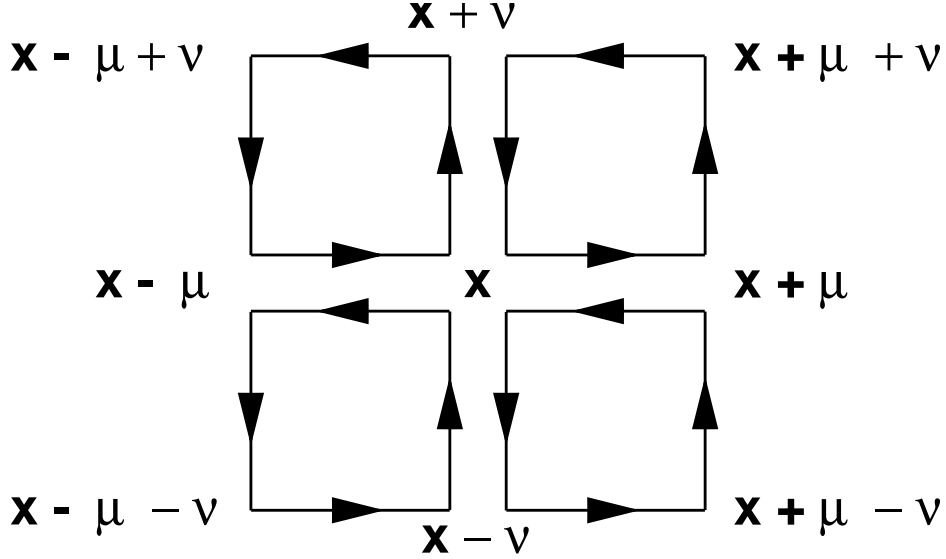


图 1-5 四叶草项示意图，来自文章 [3]

 Figure 1-5 The schematic diagram for clover term at x , which is $\hat{F}_{\mu\nu}(x)$.

真空期望值（需要在 Landau 规范下进行计算）通常会小于 1。这意味着我们可以通过计算格点上的算符真空期望值 u_0 并将连续极限展开定义为：

$$U_\mu(x) \approx u_0(1 + iagA_\mu(x)). \quad (1-52)$$

这样，在计算作用量时可以简单地将规范链接 U_μ 替换为 U_μ/u_0 ，从而使其一阶展开行为更贴近于连续形式的结果，这样就提高了规范作用量在连续极限下收敛到连续情形的速度。由于规范链接的真空期望值是规范依赖的，想要使用该方法得到 u_0 需要首先进行规范固定。这被称为平均场方法，具体计算为 $u_0 = \langle \frac{1}{3}\text{Tr}U_\mu \rangle$ ，其中尖括号表明对全空间所有项做平均值。为了节省算力，我们在实践中通常使用规范不变的算符真空期望值来获得 u_0 ，这样则可以略去规范固定的步骤。在目前的实现中，则是利用小方格进行计算，

$$u_0 = \left\langle \frac{1}{3}\text{ReTr}W_{\mu\nu}^{1\times 1}(x) \right\rangle^{\frac{1}{4}}. \quad (1-53)$$

Lepage 和 Mackenzie 在文章中提到，上述的两种方法会给出相似的结果。

1.2.5 四叶草费米子作用量

B. Sheikholeslami 和 R. Wohlert 将 Symanzik 分析过程应用到了费米子作用量上^[33]。通过引入所有可能的维数为 5 的格点双线性算符，以合适的参数与 Wilson 作用量进行线性组合，从而获得 $\mathcal{O}(a^2)$ 改进的费米子作用量，

$$S_{\text{SW}}[U_\mu, \bar{\psi}, \psi] = a^4 \sum_x \bar{\psi}(x) \left[\frac{1}{2} \sum_\mu (\nabla_\mu + \nabla_\mu^*) \gamma_\mu - \frac{ar}{2} \sum_\mu \nabla_\mu \nabla_\mu^* + m_0 + \sum_{\mu < \nu} \frac{ac_{\text{SW}}}{2} \sigma_{\mu\nu} \hat{F}_{\mu\nu}(x) \right] \psi(x), \quad (1-54)$$

其中 c_{SW} 参数即为 Sheikholeslami-Wohlert 系数, 其值在微扰树图阶为 1; $\sigma_{\mu\nu} = -\frac{i}{2}[\gamma_\mu, \gamma_\nu]$; $\hat{F}_{\mu\nu}$ 为格点上的场强张量形式。 c_{SW} 也可以使用平均场方法^[32] 或者非微扰地^[34] 确定。

$$\begin{aligned} \hat{F}_{\mu\nu}(x) = \frac{1}{a^2} \frac{1}{8i} & \left[U_\mu(x) U_\nu(x + \mu) U_\mu^\dagger(x + \nu) U_\nu^\dagger(x) \right. \\ & + U_\nu(x) U_\mu^\dagger(x + \nu - \mu) U_\nu^\dagger(x - \mu) U_\mu(x - \mu) \\ & + U_\mu^\dagger(x - \mu) U_\nu^\dagger(x - \mu - \nu) U_\mu(x - \mu - \nu) U_\nu(x - \nu) \\ & \left. + U_\nu^\dagger(x - \nu) U_\mu(x - \nu) U_\nu(x - \nu + \mu) U_\mu^\dagger(x) - h.c. \right]. \end{aligned} \quad (1-55)$$

这便是 Sheikholeslami-Wohlert 费米子作用量的形式。 $\hat{F}_{\mu\nu}$ 项由相同顶点 $\mu\nu$ 平面四个小方格构成的, 如图 1-5, 其形状与四叶草类似, 因此 Sheikholeslami-Wohlert 作用量也被称为四叶草 (clover) 作用量。同样的, 四叶草改进的费米子作用量也可以应用蝌蚪图对规范链接的改进, 即使用 U_μ/u_0 替代 U_μ 进行作用量的计算。

连续的情形下, 费米子场在手征变换下保持作用量不变:

$$\psi \rightarrow e^{i\alpha\gamma_5}\psi, \quad \bar{\psi} \rightarrow \bar{\psi}e^{i\alpha\gamma_5}, \quad (1-56)$$

α 取实数。而对于格点作用量来说, 手征对称性其实是要求:

$$\gamma_5 \mathcal{M} + \mathcal{M} \gamma_5 = 0. \quad (1-57)$$

显然, 非零的质量项 m_0 会破缺手征对称性。即使考虑无质量的费米子 $m_0 = 0$, 也会发现 Wilson 作用量和四叶草作用量引入的两个维数为 5 的算符 $\nabla_\mu \nabla_\mu^*$ 和 $\sigma_{\mu\nu} \hat{F}_{\mu\nu}$ 均无法满足式 (1-57), 即 Wilson 作用量和四叶草作用量都会破缺手征对称性。但是手征对称性在轻夸克的研究中又是重要的, 此时我们不得不考虑其影响。天真费米子作用量能够满足手征对称性, 但是有费米子加倍问题; 改进作用量可以消除加倍子但是手征对称性完全破缺: 这便是在选择作用量需要面对的取舍。

为了讨论这个问题, H. B. Nielsen 和 M. Ninomiya 提出了 no-go 定理^[35-37], 具体表述为: 在偶数维的离散欧式时空中, 具有 Hermiticity, 局域性, 平移不变的格点作用量无法在解决费米子加倍问题的同时满足手征对称性。为了避开 no-go 定理, M. Lüscher^[38] 利用 Ginsperg-Wilson 关系^[39] 定义了格点上满足手征对称性同时没有加倍问题的作用量。Paul H. Ginsperg 和 Kenneth G. Wilson 指出, 可以将手征对称性表达式 (1-57) 修改为

$$\gamma_5 \mathcal{M} + \mathcal{M} \gamma_5 = a \mathcal{M} \gamma_5 \mathcal{M}, \quad (1-58)$$

当取连续极限 $a \rightarrow 0$ 时, 上式回到连续的情形。在应用上式作为手征对称性时, 手征变换被定义为

$$\psi \rightarrow e^{i\alpha\gamma_5(1-\frac{a}{2}\mathcal{M})}\psi, \quad \bar{\psi} \rightarrow \bar{\psi}e^{i\alpha\gamma_5(1-\frac{a}{2}\mathcal{M})}. \quad (1-59)$$

满足格点上手征对称性 (1-58) 的格点费米子作用量有筹壁 (domain-wall) 作用量^[40-43], 交叠 (overlap) 作用量^[44-49] 和固定点 (fixed-point, perfect) 作用量^[50-51]。另外, 交错 (staggered) 作用量^[52-54] 或称 Kogut-Susskind 作用量在不完全消除加倍问题的情况下保留了部分手征对称性, 同时计算开销较其他作用量小一个数量级, 因此尽管有一些缺陷, 已经有许多重要的物理成果通过这种作用量给出^[55-58]。

本文的研究工作在 u, d 夸克不很轻的条件下进行, 我们实际上选用了四叶草作用量进行后续的数值计算, 暂不考虑其对手征对称性的影响。结合 (1-49), 最终得到了格点上的 QCD 作用量:

$$\begin{aligned}
 S_{\text{LQCD}} = & \frac{2}{g^2} \sum_x \sum_{\mu < \nu} \left[\frac{5}{3u_0^4} P_{\mu\nu}(x) - \frac{1}{12u_0^6} R_{\mu\nu}(x) - \frac{1}{12u_0^6} R_{\nu\mu}(x) \right] + a^4 \bar{\psi} \mathcal{M} \psi. \\
 2\kappa a \mathcal{M}_{xy} = & \left[1 + \sum_{\mu < \nu} \frac{a^2 \kappa}{u_0^4} \sigma_{\mu\nu} \hat{F}_{\mu\nu}(x) \right] \delta_{x,y} \\
 & - \frac{\kappa}{u_0} \sum_{\mu=1}^4 \left[(1 - \gamma_\mu) U_\mu(x) \delta_{x+\mu,y} + (1 + \gamma_\mu) U_\mu^\dagger(x - \mu) \delta_{x-\mu,y} \right].
 \end{aligned} \tag{1-60}$$

以上, 我们采用了 Symanzik 改进的规范作用量 (Lüscher-Weisz 作用量, 树图阶) 和四叶草费米子作用量 (Sheikholeslami-Wohlert 作用量, 树图阶), 并应用了蝌蚪图贡献对规范链接的改进。

1.3 各向异性的格点 QCD 作用量

各向异性的 (anisotropic) 格点是一种离散化欧氏时空的方案, 这种格点的特点是不同方向的格距不同, 通常而言时间方向的格距更小。这种格点在研究重夸克, 胶球, 混杂态和高温热力学等物理问题时在时间方向能提供更高的分辨率^[59]。

出于物理目标上的考虑, 同时生成各向异性格点的开销相比于同样格子大小的各向同性 (isotropic) 格点小, 最终我们选用了这样的方案进行研究。需要注意的是, 由于时间和空间方向格距不同, 上一节提到的格点作用量还需要做更多的修改。在之后的讨论中, 使用 s 指代空间方向, 并用 i 或 j 标记其三个分量; 使用 t 指代时间方向并用 4 标记分量。在趋于连续极限时, 时间和空间方向格距比例固定, 因此涉及时间方向的项和纯空间方向的项趋于连续极限的行为将会不同。

1.3.1 各向异性的四叶草费米子作用量

我们来讨论格点上的费米子作用量形式。T. R. Klassen 提出^[60] 写下所有最高维数为 5 的双线性算符, 将时间和纯空间方向分离, 并通过场变换舍弃各向同

性形式中没有出现的项,

$$\frac{1}{2}(\nabla_i + \nabla_i^*)\gamma_i, \frac{1}{2}(\nabla_4 + \nabla_4^*)\gamma_4, -\frac{a_s}{2}\nabla_i\nabla_i^*, -\frac{a_t}{2}\nabla_4\nabla_4^*, \frac{a_s}{2}\sigma_{ij}\hat{F}_{ij}, \frac{a_s}{2}\sigma_{i4}\hat{F}_{i4}, \quad (1-61)$$

这里出现了两个格距 a_s 和 a_t , 定义为 $a_\mu = (a_s, a_s, a_s, a_t)$ 。通常使用 $\xi_0 = \frac{a_s}{a_t}$ 来描述各向异性格点的空间和时间方向比值。我们一般选择使用时间方向格距 a_t 和各向异性 ξ_0 来描述作用量形式。对于 Wilson 作用量中的项, 即式 (1-61) 中前 4 项, 假定在各向同性情形下回到相应的作用量形式, 因此可以确定时间两项或空间两项的相对系数。为了书写方便, 我们定义 Wilson 算符

$$W_\mu = \frac{1}{2}(\nabla_\mu + \nabla_\mu^*) - \frac{a_\mu}{2}\gamma_\mu\nabla_\mu\nabla_\mu^*, \quad (1-62)$$

则各向同性的格点上四叶草作用量可以写成

$$S_{\text{Clover}} = a^4 \sum_x \left(m_0 + \sum_\mu \gamma_\mu W_\mu + \frac{a}{2} \sum_{\mu < \nu} \sigma_{\mu\nu} \hat{F}_{\mu\nu} \right). \quad (1-63)$$

将式 (1-61) 中的所有项线性组合得到各向异性格点下的四叶草作用量

$$S_{\text{Clover}} = a_s^3 a_t \sum_x \bar{\psi} \left[m_0 + \nu_t \gamma_4 W_4 + \nu_s \sum_i \gamma_i W_i + \frac{a_s c_{\text{SW}}^t}{2} \sum_i \sigma_{i4} \hat{F}_{i4}(x) + \frac{a_s c_{\text{SW}}^s}{2} \sum_{i < j} \sigma_{ij} \hat{F}_{ij}(x) \right] \psi. \quad (1-64)$$

其中 $\nu_t, \nu_s, c_{\text{SW}}^t, c_{\text{SW}}^s$ 是线性组合的系数, 这些系数意味着作用量在时间和空间方向上的连续极限行为将不再一致。这就是各向异性格子上四叶草费米子作用量的一般形式。

现在我们来计算组合系数。M. Alford, T. R. Klassen 和 G. P. Lepage 早在 1996 年就提出^[61-62] 可以通过场变换解决费米子加倍问题并同时保持作用量的树图阶改进 ($\mathcal{O}(a)$)。考虑到天真费米子作用量是没有 $\mathcal{O}(a)$ 偏移的, 那么从一个质量为 m 的费米子场 ψ_q 的天真作用量形式出发,

$$S = a^4 \sum_x \bar{\psi}_q \left[m + \sum_\mu \nabla_\mu \gamma_\mu \right] \psi_q. \quad (1-65)$$

这里的 ∇_μ 并非之前定义的格点上的协变差分的形式, 仅是一个表达格点上偏导数的记号。考虑到对费米子场进行场变换, 体现在路径积分中就是积分变量的代换, 它对于配分函数的计算不会产生影响, 因此不会对在壳的可观测量有其他影响。P. Chen^[63] 参照所有维数为 5 的算符形式给出场变换,

$$\begin{cases} \psi_q = \left[1 + \frac{\Omega_m}{2} a_t m + \frac{\Omega_t}{2} a_t \gamma_4 \nabla_4 + \frac{\Omega_s}{2} a_s \sum_i \nabla_i \right] \psi \\ \bar{\psi}_q = \bar{\psi} \left[1 + \frac{\Omega_m}{2} a_t m + \frac{\Omega_t}{2} a_t \gamma_4 \nabla_4 + \frac{\Omega_s}{2} a_s \sum_i \nabla_i \right] \end{cases} \quad (1-66)$$

接下来对于新的场 ψ ，考虑它的费米子矩阵形式。上式代入后会产生项

$$\{\nabla_\mu \gamma_\mu, \nabla_\nu \gamma_\nu\}, \quad (1-67)$$

实际上这与四叶草项 $\sigma_{\mu\nu} \hat{F}_{\mu\nu}$ 是同一个含义。二阶空间偏导的项天然组成了平方项和对称组合，而时间偏导和空间偏导的交叉项还有额外的反对称组合：

$$[\nabla_4 \gamma_4, \nabla_i \gamma_i], \quad (1-68)$$

这一项的系数为 $\frac{\Omega_t - \bar{\Omega}_t}{4} a_t - \frac{\Omega_s - \bar{\Omega}_s}{4} a_s$ 。在四叶草费米子作用量中，并没有类似的项存在，而它的计算也颇为困难，因此如前所述选择令 $\Omega_m = \bar{\Omega}_m, \Omega_s = \bar{\Omega}_s, \Omega_t = \bar{\Omega}_t$ 将这一项消去。使用上述的代换，得到对应于费米子场 ψ 的费米子矩阵

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_\psi = & (1 + ma_t \Omega_m) m + (1 + ma_t \Omega_m + ma_t \Omega_t) \nabla_4 \gamma_4 \\ & + (1 + ma_t \Omega_m + ma_s \Omega_s) \sum_i \nabla_i \gamma_i + a_t \Omega_t \nabla_4 \nabla_4 + a_s \Omega_s \sum_i \nabla_i \nabla_i \\ & + a_s \Omega_s \sum_{i < j} \sigma_{ij} \hat{F}_{ij} + \frac{1}{2} (a_s \Omega_s + a_t \Omega_t) \sum_i \sigma_{i4} \hat{F}_{i4}. \end{aligned} \quad (1-69)$$

考虑到 Wilson 算符在这些符号上的表达：

$$W_\mu = \nabla_\mu - \frac{a_\mu}{2} \gamma_\mu \nabla_\mu \nabla_\mu, \quad (1-70)$$

上述系数需要满足关系：

$$\begin{cases} -\frac{a_t}{2} (1 + ma_t \Omega_m + ma_t \Omega_t) = a_t \Omega_t, \\ -\frac{a_s}{2} (1 + ma_t \Omega_m + ma_s \Omega_s) = a_s \Omega_s. \end{cases} \quad (1-71)$$

显然的，我们可以通过调整 Ω 的值使 W_4 或 W_i 项的系数取一个固定值。通常习惯将 W_4 系数固定为 1，那么

$$1 + ma_t \Omega_m + ma_t \Omega_t = 1, \quad (1-72)$$

综合上述方程，可以解得系数之间的关系，

$$\Omega_m = \frac{1}{2}, \quad \Omega_t = -\frac{1}{2}, \quad \Omega_s = -\frac{1}{2} \frac{2 + ma_t}{2 + ma_s}, \quad (1-73)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_\psi = & \left(1 + \frac{1}{2} ma_t\right) m + \gamma_4 W_4 + \frac{2 + ma_t}{2 + ma_s} \sum_i \gamma_i W_i \\ & - \frac{a_s}{2} \frac{2 + ma_t}{2 + ma_s} \sum_{i < j} \sigma_{ij} \hat{F}_{ij} - \frac{1}{2} \left(\frac{a_s}{2} \frac{2 + ma_t}{2 + ma_s} + \frac{a_t}{2} \right) \sum_i \sigma_{i4} \hat{F}_{i4}. \end{aligned} \quad (1-74)$$

现在，将上式与一般形式 (1-64) 进行对比，容易得到各向异性格子上树图阶改进的四叶草作用量的具体形式，

$$m_0 = \left(1 + \frac{1}{2} ma_t\right) m, \quad \nu_t = 1, \quad \nu_s = \frac{2 + ma_t}{2 + ma_s}, \quad c_{\text{SW}}^t = -\frac{1}{2} \left(\nu_s + \frac{a_t}{a_s} \right), \quad c_{\text{SW}}^s = -\nu_s. \quad (1-75)$$

我们通常使用记号 $\nu = \nu_s$ ，代入 $\xi_0 = \frac{a_s}{a_t}$ ：

$$S_{\text{Clover}} = a_s^3 a_t \sum_x \bar{\psi} \left[m_0 + \gamma_4 W_4 + \nu \sum_i \gamma_i W_i - \frac{a_s}{4} \left(\nu + \frac{1}{\xi_0} \right) \sum_i \sigma_{i4} \hat{F}_{i4}(x) - \frac{a_s \nu}{2} \sum_{i < j} \sigma_{ij} \hat{F}_{ij}(x) \right] \psi. \quad (1-76)$$

通常称呼 ν 为裸光速。需要注意的是，场强张量算符 $\hat{F}_{\mu\nu}$ 的定义式 (1-55) 中存在一个量纲因子 $\frac{1}{a^2}$ 。我们使用无量纲的场强张量算符 $\hat{\tilde{F}}_{\mu\nu}$ 代入定义式

$$\hat{F}_{ij} = \frac{1}{a_s^2} \hat{\tilde{F}}_{ij}, \quad \hat{F}_{i4} = \frac{1}{a_s a_t} \hat{\tilde{F}}_{ij}. \quad (1-77)$$

将 $\hat{F}_{\mu\nu}$ 重新定义为上述无量纲的算符，现在我们可以写出费米子矩阵：

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{xy} = & \left[m_0 + \frac{1}{a_t} + \frac{3\nu}{a_s} - \frac{1}{4a_t} \left(\nu + \frac{1}{\xi_0} \right) \sum_i \sigma_{i4} \hat{F}_{i4} - \frac{\nu}{2a_s} \sum_{i < j} \sigma_{ij} \hat{F}_{ij} \right] \delta_{x,y} \\ & - \frac{1}{2a_t} \left[(1 - \gamma_4) U_4(x) \delta_{x+\hat{4},y} + (1 + \gamma_4) U_4(x - \hat{4}) \delta_{x-\hat{4},y} \right] \\ & - \frac{\nu}{2a_s} \sum_i \left[(1 - \gamma_i) U_i(x) \delta_{x+i,y} + (1 + \gamma_i) U_i(x - i) \delta_{x-i,y} \right]. \end{aligned} \quad (1-78)$$

与之前相同，我们习惯令常数项为单位矩阵：

$$\begin{aligned} 2\kappa a_t \mathcal{M} = & \left[1 - \frac{\kappa}{2} \left(\nu + \frac{1}{\xi_0} \right) \sum_i \sigma_{i4} \hat{F}_{i4} - \kappa \frac{\nu}{\xi_0} \sum_{i < j} \sigma_{ij} \hat{F}_{ij} \right] \delta_{x,y} \\ & - \kappa \left[(1 - \gamma_4) U_4(x) \delta_{x+\hat{4},y} + (1 + \gamma_4) U_4(x - \hat{4}) \delta_{x-\hat{4},y} \right] \\ & - \kappa \frac{\nu}{\xi_0} \sum_i \left[(1 - \gamma_i) U_i(x) \delta_{x+i,y} + (1 + \gamma_i) U_i(x - i) \delta_{x-i,y} \right], \end{aligned} \quad (1-79)$$

$$\kappa = \frac{1}{2 \left(m_0 a_t + 1 + \frac{3\nu}{\xi_0} \right)}. \quad (1-80)$$

我们注意到， $\xi = \xi_0/\nu$ 通常是同时出现的，有时也将 ξ_0 称为规范各向异性，而 ξ 称为费米子各向异性。

除了 Chen 的推导以外，也可以通过直接计算格点上的在壳物理量与连续物理量匹配从而得到各向异性的 Sheikholeslami-Wohlert 系数^[64-65]。需要注意的是，这两种方法会给出一些略微不同的结果，尽管它们在 $\mathcal{O}(a_s)$ 阶是一致的。

1.3.2 各向异性的 Symanzik 改进的规范作用量

将 Symanzik 改进的规范作用量 (1-49) 写成各向异性的形式似乎非常直接。在式 (1-22) 中可以发现，格距的引入是与规范链接的连续极限展开相关的。我们可以比较容易地得到 a_s^4 隐含在 P_{ij} 和 R_{ij} 中， $a_s^2 a_t^2$ 隐含在 P_{i4} 和 R_{i4} 中。由于标

准的求和因子是 $a_s^3 a_t \sum_x$ ，因此需要对这些隐含的格距因子进行补偿，结果是：

$$S_g(U_\mu) = \frac{2}{g^2} \sum_x \sum_{i < j} \left[\frac{5a_t}{3a_s} P_{ij}(x) - \frac{a_t}{12a_s} R_{ij}(x) - \frac{a_t}{12a_s} R_{ji}(x) \right] + \frac{2}{g^2} \sum_x \sum_i \left[\frac{5a_s}{3a_t} P_{i4}(x) - \frac{a_s}{12a_t} R_{i4}(x) - \frac{a_s}{12a_t} R_{4i}(x) \right], \quad (1-81)$$

但是 Colin J. Morningstar 发现^[66]，上述作用量中使用的向 t 方向延伸 2 格的 Wilson 圈，即式中的 R_{4i} 项，会使胶子谱中出现一个能量在 $2/a_t$ 阶的伪高能态，在各向异性格点中这一数值尤其的高，会对胶球的两点关联函数短时间行为产生巨大影响——这是不可接受的。我们可以通过在进行 Symanzik 分析时不将这一种 Wilson 圈纳入考虑，以 $\mathcal{O}(a_t^2)$ 改进效果为代价，使胶子谱的行为恢复正常。Morningstar 给出了更改后的规范作用量，并与 Mike J. Peardon 合作将其用于对纯规范理论上的胶球性质研究中^[67-68]。

$$S_g(U_\mu) = \frac{2}{g^2 \xi_0} \sum_x \sum_{i < j} \left[\frac{5}{3} P_{ij}(x) - \frac{1}{12} R_{ij}(x) - \frac{1}{12} R_{ji}(x) \right] + \frac{2\xi_0}{g^2} \sum_x \sum_i \left[\frac{4}{3} P_{i4}(x) - \frac{1}{12} R_{i4}(x) \right], \quad (1-82)$$

P_{i4} 项的系数变小了，用以抵消除去 R_{4i} 项的影响。Ying Chen 等人在 2005 年关于胶球谱和矩阵元的文章^[69]中给出了不同 Wilson 圈实虚部在连续极限展开情形下关于场强张量的表达式，通过带入上式中的系数，可以看到最终导致与时间方向关联的场强张量变为

$$F_{i4}^2 + a_t^2 F_{i4} (\nabla_i^2 + \nabla_4^2) F_{i4} + \mathcal{O}(a_s^2 a_t^2), \quad (1-83)$$

确实引入了额外的 $\mathcal{O}(a_t^2)$ 的偏离。

1.3.3 各向异性的蝌蚪图改进的 QCD 作用量

现在我们来考虑对作用量进行蝌蚪图改进。我们在 1.2.4 小节提到，蝌蚪图改进的动机是规范链接在做连续极限展开时有不可忽略的紫外贡献。紫外贡献可以经由做平均场得到。对于各向异性格子来说，时间方向的格距 a_t 远小于一般空间方向。Morningstar 指出^[66]，在 Landau 规范微扰论中，我们有 $1 - \langle \frac{1}{3} \text{Tr} U_t \rangle \propto (a_t/a_s)^2$ ，这意味着当我们将 $a_t \ll a_s$ 时， t 方向的平均场 u_t 将会非常接近 1。因此，为了简化计算，我们直接固定 $u_t = 1$ 。而空间方向的平均场和 (1-53) 类似，采用空间方向上的小方格来进行计算：

$$u_s = \left\langle \frac{1}{3} \text{ReTr} P_{ij} \right\rangle^{\frac{1}{4}}. \quad (1-84)$$

这样，我们通过替换作用量中的 U_i 为 U_i/u_s 即可完成蝌蚪图改进。

对于 (1-82) 描述的规范作用量, 我们进行如下改进:

$$S_g(U_\mu) = \frac{2}{g^2 \xi_0} \sum_x \sum_{i < j} \left\{ \left[\frac{5}{3u_s^4} P_{ij}(x) - \frac{1}{12u_s^6} R_{ij}(x) - \frac{1}{12u_s^6} R_{ji}(x) \right] + \frac{2\xi_0}{g^2} \sum_x \sum_i \left[\frac{4}{3u_s^2} P_{i4}(x) - \frac{1}{12u_s^4} R_{i4}(x) \right] \right\}, \quad (1-85)$$

对于 (1-79) 描述的费米子作用量, 我们进行如下改进:

$$2\kappa a_t \mathcal{M} = \left[1 - \frac{\kappa}{2u_s^2} \left(\nu + \frac{1}{\xi_0} \right) \sum_i \sigma_{i4} \hat{F}_{i4} - \frac{\kappa}{u_s^4 \xi_0} \sum_{i < j} \sigma_{ij} \hat{F}_{ij} \right] \delta_{x,y} - \kappa \left[(1 - \gamma_4) U_4(x) \delta_{x+\hat{4},y} + (1 + \gamma_4) U_4(x - \hat{4}) \delta_{x-\hat{4},y} \right] - \frac{\kappa}{u_s \xi_0} \sum_i \left[(1 - \gamma_i) U_i(x) \delta_{x+i,y} + (1 + \gamma_i) U_i(x - i) \delta_{x-i,y} \right]. \quad (1-86)$$

至此为止, 我们已经完成了大部分与物理相关的准备。我们通过设置空间和时间方向格距不同得到了各向异性格点, 并在此基础上推导了各向异性的格点 QCD 作用量 (1-85) 和 (1-86), 其中应用了 Symanzik 改进, 四叶草改进和蝌蚪图改进。接下来的一节我们将更多关注数值上的一些实现和技巧, 并阐述产生组态的具体流程。

1.4 物理可观测量

格点 QCD 总是需要计算物理可观测量才可以与真实的物理世界联系起来, 我们在格点上可以通过第一性原理计算出这些可观测量, 它们应当包含了所有的 QCD 效应。

1.4.1 夸克传播子和组态平均

首先我们来计算夸克传播子。在 1.2.3 小节中, 式 (1-31) 意味着可以通过求解费米子矩阵的逆得到费米子传播子。该式是在一个没有规范场的格点作用量上推导的, 现在我们将它推广到带有规范作用量的形式。考虑一个格点 QCD 作用量

$$S_{\text{LQCD}}(U_\mu, \bar{\psi}, \psi) = S_g(U_\mu) + S_f(U_\mu, \bar{\psi}, \psi), \quad (1-87)$$

有路径积分形式

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}U_\mu \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-S_{\text{LQCD}}(U_\mu, \bar{\psi}, \psi)}, \quad (1-88)$$

$$\langle \mathcal{O} \rangle_T = \frac{1}{\mathcal{Z}} \int \mathcal{D}U_\mu \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \mathcal{O} e^{-S_{\text{LQCD}}(U_\mu, \bar{\psi}, \psi)}. \quad (1-89)$$

相较之前的形式多了一个对规范链接值空间的积分。首先我们尝试先行计算费米子场积分。由于费米子具有反对易的性质, 需要使用 Grassmann 数来描述费米

子场, 它们遵循外代数 (exterior algebra) 或称 Grassmann 代数, 即 $\psi_x \psi_y = -\psi_y \psi_x$ 。对于一个 Grassmann 数 ξ , 有两个重要的积分式 $\int d\xi \xi = 1$, $\int d\xi = 0$ 。考虑我们总共有时空体积 V 个自由度, 对于积分式

$$\int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-\bar{\psi} \mathcal{M} \psi} = \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-\sum_{x,y=1}^V \bar{\psi}_x \mathcal{M}_{xy} \psi_y}. \quad (1-90)$$

显然的, 我们有 $\psi_x \psi_x = 0$, 使用此性质对被积项进行 Taylor 展开, 则 $\bar{\psi}_x$ 和 ψ_y 的高阶项全部消失,

$$e^{-\sum_{x,y=1}^V \bar{\psi}_x \mathcal{M}_{xy} \psi_y} = \prod_{x,y=1}^V e^{-\bar{\psi}_x \mathcal{M}_{xy} \psi_y} = \prod_{x,y} (1 - \bar{\psi}_x \mathcal{M}_{xy} \psi_y). \quad (1-91)$$

上式还用到了 $[\psi_x \psi_y, \psi_z \psi_w] = 0$ 。

$$\begin{aligned} & \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-\bar{\psi} \mathcal{M} \psi} \\ &= \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \prod_{x,y=1}^V (1 - \bar{\psi}_x \mathcal{M}_{xy} \psi_y) \\ &= \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \sum_{\{i\}, \{j\}} \left[\eta(i_1 \dots i_V) \eta(j_1 \dots j_V) \mathcal{M}_{x_{i_1} y_{j_1}} \dots \mathcal{M}_{x_{i_V} y_{j_V}} \prod_{x,y=1}^V \bar{\psi}_x \psi_y \right] \end{aligned} \quad (1-92)$$

其中 $\eta(i_1 \dots i_V)$ 是置换 $\{i_1 \dots i_V\}$ 的置换宇称, $\{i\}$ 和 $\{j\}$ 取遍置换空间。上式的第二个等号不仅使用了反对易性质, 还使用了 Grassmann 数积分式 $\int d\xi = 0$, 这两个性质使得没有取遍空间的项消失了。接下来我们继续使用 Grassmann 数的第二个积分式 $\int d\xi \xi = 1$, 最终得到了 Grassmann 数的 Gaussian 积分

$$\begin{aligned} & \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi e^{-\bar{\psi} \mathcal{M} \psi} \\ &= \sum_{\{i\}, \{j\}} \left[\eta(i_1 \dots i_V) \eta(j_1 \dots j_V) \mathcal{M}_{x_{i_1} y_{j_1}} \dots \mathcal{M}_{x_{i_V} y_{j_V}} \right] \\ &= \det(\mathcal{M}). \end{aligned} \quad (1-93)$$

后一个等号完全是行列式的定义。现在, 对于某个规范场而言,

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}U_\mu e^{-S_g(U_\mu)} \det [\mathcal{M}(U_\mu)], \quad (1-94)$$

$$\langle \mathcal{O} \rangle_{T, \text{fermion}} = \det [\mathcal{M}(U_\mu)]^{-1} \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \mathcal{O} e^{-\bar{\psi} \mathcal{M}(U_\mu) \psi}, \quad (1-95)$$

$$\langle \mathcal{O} \rangle_T = \frac{1}{\mathcal{Z}} \int \mathcal{D}U_\mu e^{-S_g(U_\mu)} \det [\mathcal{M}(U_\mu)] \langle \mathcal{O} \rangle_{T, \text{fermion}}. \quad (1-96)$$

从上式可以看出来, 我们可以在某个特定规范链接下计算算符期望值 (这一期望值符合路径积分的形式), 随后再进行规范链接积分。现在回顾不带规范作用量

表 1-1 内插场 Γ 对应的夸克双线性型的量子数Table 1-1 Quantum numbers for quark bilinears with interpolating fields Γ

Naming	a_0	π	$\pi(2)$	b_0	a_1	ρ	$\rho(2)$	b_1	Spatial derivative
Γ	1	γ_5	$\gamma_5\gamma_4$	γ_4	$\gamma_5\gamma_i$	γ_i	$\gamma_i\gamma_4$	$\epsilon_{ijk}\gamma_j\gamma_k$	∇_i
J	0	0	0	0	1	1	1	1	1
C	+1	+1	+1	-1	+1	-1	-1	-1	-1
P	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	-1
T	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1
Hermiticity	+1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	-1	+1

的费米子传播子形式 (1-31)，我们可以说：在某个规范场下，费米子传播子就是费米子矩阵的逆。

$$S^\psi(x, y) = \langle \psi_x \bar{\psi}_y \rangle_{\text{fermion}} = [\mathcal{M}^{-1}(U_\mu)]_{xy} \quad (1-97)$$

得到了算符在费米子场下的期望值后，还需要对规范链接积分。但是规范链接的积分维度非常多，普通的数值积分方法显然无法在这里使用。我们观察 (1-96) 的形式，可以发现它可以看作是 $\langle \mathcal{O} \rangle_{T, \text{fermion}}$ 在规范链接概率分布为 $\frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-S_g(U_\mu)} \det[\mathcal{M}(U_\mu)]$ 情形下的期望值。这样的解释意味着，我们可以按照概率分布得到一些不同的规范链接组态，当组态数量足够多时，将这些组态上的算符费米子场期望值做平均，就可以得到一个对积分结果的近似。显然的，组态数量越多，这样的平均值就是对积分结果越好的近似。参照统计力学的说法，一系列按照概率分布得到的组态 $\{U_\mu\}$ 是对系综（ensemble）空间的采样，这样的一套组态就被称为规范系综（gauge ensemble）。

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O} \rangle_T &= \int \mathcal{D}U_\mu \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-S_g(U_\mu)} \det[\mathcal{M}(U_\mu)] \langle \mathcal{O} \rangle_{T, \text{fermion}} \\ &\approx \frac{1}{N} \sum_{\{U_\mu\}} \langle \mathcal{O} \rangle_{T, \text{fermion}} \text{ with } N \left\{ U_\mu \sim \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-S_g(U_\mu)} \det[\mathcal{M}(U_\mu)] \right\}. \end{aligned} \quad (1-98)$$

接下来的文章中，不加说明的尖括号对 $\langle \dots \rangle$ 将代表可观测量对规范链接组态作平均之后的结果，其内部将是算符在某个规范链接组态上的费米子场期望值。

1.4.2 夸克双线性型和两点关联函数

在介子谱计算中，我们通常使用局域夸克双线性型 $\bar{\psi}_1 \Gamma \psi_2$ 来描述简单介子^[70]，其中 Γ 是 16 个 Dirac 矩阵之一，它们也是最简单的介子内插场算符（interpolating field）。在使用欧氏空间 Dirac 矩阵的情形下，正反夸克对构成的双线性型的内插场 Γ 对应的量子数和 Hermiticity 见表 1-1。可以看到，在欧氏时空中，算符 Hermiticity 为正的性质不再被保证，反而时间反演对称性始终是正的。表中还有一个空间导数 ∇_i 的量子数，它实际上是向左和向右的导数做差

$$\nabla_\mu \equiv \vec{\nabla}_\mu = \overleftarrow{\nabla}_\mu - \overrightarrow{\nabla}_\mu, \quad (1-99)$$

否则导数将不会有电荷共轭对称性^[70]（电荷共轭变换作用在导数项上其实是将箭头方向取反）。通过引入导数算符，就可以构造任意特定量子数的夸克双线性型。我们可以通过在 Γ 前添加虚数单位 i 来重新保证 Hermiticity，但同时时间反演对称性不再恒正，宇称和电荷共轭对称性不受影响。事实上，在计算两点关联函数时，Hermiticity 与时间反演对称性的乘积将是有意义的，会影响算符的选取。接下来的讨论中，我们将不考虑添加虚数单位的情形，即 Hermiticity 就代表了这两个对称性的乘积。内插场算符中可以通过添加相位因子 $e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}}$ 获得三动量为 \vec{p} 的强子算符。

考虑一个量子数为 0^{-+} ，由正反轻夸克组成的同位旋三重态电中性介子，在基态这样的粒子是 π^0 介子，是最轻的介子。我们知道，一个电中性 π 介子的波函数是

$$\mathcal{O}_\pi^\Gamma(x) \frac{1}{\sqrt{2}} [\bar{u}(x)\Gamma u(x) - \bar{d}(x)\Gamma d(x)]. \quad (1-100)$$

从表 1-1 中读出相应量子数的内插场 Γ 是 γ_5 或 $\gamma_5\gamma_4$ ，我们在这里考虑前者。事实上这两个算符都能获得 π 介子态上的投影，即

$$W_{\gamma_5} = \langle \Omega | \mathcal{O}_\pi^{\gamma_5} | \pi \rangle, \quad W_{\gamma_5\gamma_4} = \langle \Omega | \mathcal{O}_\pi^{\gamma_5\gamma_4} | \pi \rangle, \quad (1-101)$$

Ω 表示 QCD 真空，能获得投影意味着有 $W_{\gamma_5} > 0$ 和 $W_{\gamma_5\gamma_4} > 0$ 。一个 π 介子的两点函数可以写成

$$C^{(2)}(y, x) = \langle \Omega | \mathcal{O}_\pi(y) \mathcal{O}_\pi^\dagger(x) | \Omega \rangle. \quad (1-102)$$

计算中间部分的 Wick 收缩

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_\pi(y) \mathcal{O}_\pi^\dagger(x) &= -\frac{1}{2} [\bar{u}(y)\gamma_5 u(y) - \bar{d}(y)\gamma_5 d(y)] [\bar{u}(x)\gamma_5 u(x) - \bar{d}(x)\gamma_5 d(x)] \\ &= -\frac{1}{2} \text{Tr} [-S^u(x, y)\gamma_5 S^u(y, x)\gamma_5 + S^u(y, y)\gamma_5 S^u(x, x)\gamma_5 \\ &\quad - S^d(x, y)\gamma_5 S^d(y, x)\gamma_5 + S^d(y, y)\gamma_5 S^d(x, x)\gamma_5 \\ &\quad - S^d(y, y)\gamma_5 S^u(x, x)\gamma_5 - S^u(y, y)\gamma_5 S^d(x, x)\gamma_5], \end{aligned} \quad (1-103)$$

$\frac{1}{2}$ 前的负号来自于 γ_5 对应的内插场算符有反 Hermitian 性质。我们一般考虑质量简并的 u, d 夸克，这意味着它们对应的传播子是相同的，即 $S^u(x, y) = S^d(x, y) = S^q(x, y) = (\mathcal{M}^{-1})_{xy}$ ，这里记 q 为轻夸克。

$$\mathcal{O}_\pi(y) \mathcal{O}_\pi^\dagger(x) = -\frac{1}{2} \text{Tr} [-2S^q(x, y)\gamma_5 S^q(y, x)\gamma_5] = \text{Tr} [S^q(x, y)\gamma_5 S^q(y, x)\gamma_5]. \quad (1-104)$$

考虑格点上的情形，我们有

$$C^{(2)}(y, x) = \langle \mathcal{O}_\pi(y) \mathcal{O}_\pi^\dagger(x) \rangle = \text{Tr} \langle (\mathcal{M}^{-1})_{xy} \gamma_5 (\mathcal{M}^{-1})_{yx} \gamma_5 \rangle. \quad (1-105)$$

回忆费米子矩阵的 γ_5 -Hermiticity 式 (1-28),

$$C^{(2)}(y, x) = \text{Tr} \left\langle (\mathcal{M}^{-1})_{yx}^\dagger (\mathcal{M}^{-1})_{yx} \right\rangle = \left\langle \|(\mathcal{M}^{-1})_{yx}\|^2 \right\rangle. \quad (1-106)$$

这里的共轭转置和取模作用在来自于 Dirac 矩阵的旋量空间和来自规范链接的颜色空间。这样, 我们得到了一个 π 介子在格点 QCD 理论中的两点关联函数表达式, 形式上恰好是费米子矩阵逆在—对时空点上的模方。

我们一般通过这样的两点关联函数提取相关粒子的质量。对于 π 介子的两点关联函数, 我们可以推导它与介子质量相关的形式。首先有

$$\langle \Omega | \mathcal{O}_\pi(y) \mathcal{O}_\pi^\dagger(x) | \Omega \rangle = \sum_i \sum_{\vec{p}} \langle \Omega | \mathcal{O}_\pi(y) | \pi^{(i)}(\vec{p}) \rangle \frac{1}{2V E_\pi^{(i)}(\vec{p})} \langle \pi^{(i)}(\vec{p}) | \mathcal{O}_\pi^\dagger(x) | \Omega \rangle. \quad (1-107)$$

上式中使用了一套 π 介子的能量动量本征态的算符完全集

$$1 = \sum_i \sum_{\vec{p}} |\pi^{(i)}(\vec{p})\rangle \frac{1}{2V E_\pi^{(i)}(\vec{p})} \langle \pi^{(i)}(\vec{p})| + |\Omega\rangle \langle \Omega|, \quad (1-108)$$

(i) 表征不同的激发态, 真空项因为 $\langle \Omega | \mathcal{O} | \Omega \rangle = 0$ 被忽略。考虑我们的算符 $\mathcal{O}_\pi(x)$, 使用平移算符将其平移到 $(0, 0, 0, x_4)$ 的位置, 接着使用时间演化算符得到 $(0, 0, 0, 0)$ 的算符, 现在可以统一使用 Schrödinger 绘景来描述 \mathcal{O} , 将使用符号 $\mathcal{O}(0)$ 来指代这样的算符,

$$\mathcal{O}(\vec{x}, t) = e^{\hat{H} x_4} e^{-i \hat{\vec{p}} \cdot \vec{x}} \mathcal{O}(0) e^{-\hat{H} x_4} e^{i \hat{\vec{p}} \cdot \vec{x}}, \quad (1-109)$$

\hat{H} 是 Hamiltonian 算符, $\hat{\vec{p}}$ 是动量算符, 使用了 Wick 转动 $p_4 = i p_0$ 。它将会在能量本征态 $|\pi^{(i)}(\vec{p})\rangle$ 上有投影 $W^{(i)}$ [70], 与动量无关。

$$\begin{aligned} \langle \Omega | \mathcal{O}_\pi(y) \mathcal{O}_\pi^\dagger(x) | \Omega \rangle &= \sum_i \sum_{\vec{p}} \frac{e^{i \vec{p} \cdot (\vec{y} - \vec{x})} e^{-E_\pi^{(i)}(\vec{p}) \cdot (y_4 - x_4)}}{2V E_\pi^{(i)}(\vec{p})} \langle \Omega | \mathcal{O}_\pi(0) | \pi^{(i)}(\vec{p}) \rangle \langle \pi^{(i)}(\vec{p}) | \mathcal{O}_\pi^\dagger(0) | \Omega \rangle \\ &= \sum_i \sum_{\vec{p}} \frac{e^{-i \vec{p} \cdot (\vec{x} - \vec{y})} e^{-E_\pi^{(i)}(\vec{p}) \cdot (y_4 - x_4)}}{2V E_\pi^{(i)}(\vec{p})} |W^{(i)}|^2 \end{aligned} \quad (1-110)$$

显然的有结论 $C^{(2)}(y, x) = C^{(2)}(y - x)$ 。我们现在将末态的算符做 Fourier 变换到动量 \vec{p}' 上, 并设置 $t = y_4, t_0 = x_4 = 0$,

$$\begin{aligned} \langle \Omega | \mathcal{O}_\pi(\vec{p}', t) \mathcal{O}_\pi^\dagger(\vec{x}, 0) | \Omega \rangle &= \sum_i \sum_{\vec{y}} \sum_{\vec{p}} \frac{e^{i \vec{p} \cdot \vec{y}} e^{-i \vec{p}' \cdot \vec{y}} e^{-i \vec{p} \cdot \vec{x}} e^{-E_\pi^{(i)}(\vec{p}) t}}{2V E_\pi^{(i)}(\vec{p})} |W^{(i)}|^2 \\ &= \sum_i \sum_{\vec{p}} \frac{\delta^3(\vec{p} - \vec{p}') e^{-i \vec{p} \cdot \vec{x}} e^{-E_\pi^{(i)}(\vec{p}) t}}{2E_\pi^{(i)}(\vec{p})} |W^{(i)}|^2 \\ &= \sum_i \frac{e^{-i \vec{p}' \cdot \vec{x}} |W^{(i)}|^2}{2E_\pi^{(i)}(\vec{p}')} e^{-E_\pi^{(i)}(\vec{p}') t} \end{aligned} \quad (1-111)$$

在 $t \gg 1$ 时, 所有激发态被压低, 这个形式只剩下了基态相关的项 $\frac{|W^{(1)}|^2}{2VE_\pi(\vec{p})}e^{-E_\pi(\vec{p})t}$ 。在格点上, 我们再考虑时间方向的周期性边界条件, 这意味着还有一个形式为 $\frac{|W^{(1)}|^2}{2VE_\pi(\vec{p})}e^{-E_\pi(\vec{p})(L_t-t)}$ 的反向传播项, 令 $\vec{x} = (0, 0, 0)$, 最后得到了格点上动量为 \vec{p} 的 π 介子两点关联函数形式,

$$\begin{aligned} C^{(2)}(\vec{p}; t, 0) &= \frac{|W^{(1)}|^2}{2VE_\pi(\vec{p})} [e^{-E_\pi(\vec{p})t} + e^{-E_\pi(\vec{p})(L_t-t)}] \\ &= \frac{|W^{(1)}|^2 e^{-E_\pi(\vec{p})\frac{L_t}{2}}}{VE_\pi(\vec{p})} \cosh \left[-E_\pi(\vec{p}) \left(t - \frac{L_t}{2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (1-112)$$

现在我们可以计算介子的两点关联函数, 再通过上式获得介子能量,

$$\frac{C^{(2)}(t+1, 0; \vec{p}) + C^{(2)}(t-1, 0; \vec{p})}{2C^{(2)}(t, 0; \vec{p})} = \frac{e^{-E_\pi(\vec{p})} + e^{E_\pi(\vec{p})}}{2} = \cosh[E_\pi(\vec{p})]. \quad (1-113)$$

通过简单的 arccosh 即可反解介子能量 $E_\pi(\vec{p})$ 。我们将这样反解得到的“质量”称为有效质量 m_{eff} ,

$$m_{\text{eff}}(t) = \cosh^{-1} \frac{C^{(2)}(t+1) + C^{(2)}(t-1)}{2C^{(2)}(t)}. \quad (1-114)$$

需要特别注意, 若是 \mathcal{O} 的量子数为 0^{++} , 会有真空期望值 $\langle \Omega | \mathcal{O} | \Omega \rangle = W^{(0)} \neq 0$, 应当在关联函数中添加一个额外的常数项。

对于多点关联函数, 应用上文的方法都可以得到格点上相应的值, 通过这些关联函数可以计算出更多的物理可观测量, 这就是格点 QCD 的基本计算方法。

1.5 费米子矩阵的逆

费米子矩阵的逆在格点 QCD 计算中有非常重要的重要性, 许多数值上的算法和技巧被应用于这一过程, 包括各种迭代求解器的预处理和规范场涂摩。

1.5.1 源, 汇和传播子

现在我们来考虑费米子传播子, 也就是格点上费米子矩阵的逆的计算方法。假设一个空间方向长度为 32, 时间方向长度为 64 的不大的格子, 其费米子矩阵的维数将会来到 $32^3 \times 64 \times 3 \times 4 = 25165824$, 这是一个非常巨大的数字, 完全不可能通过解析求解的方式获得它的整个逆矩阵, 即使数值求解也要求目前不可能达到的计算能力。因此, 通常采用数值求解线性方程组的方法来获得费米子矩阵逆的某些元素, 而非整个矩阵。考虑一个仅在时空点 x , 旋量指标 α , 色指标 a 处为 1, 其他位置均为 0 的单位向量 $b^{x,\alpha,a}$, 令

$$\mathcal{M}x = b^{x,\alpha,a}, \quad (1-115)$$

显式写出所有指标, 并默认求和所有重复指标,

$$\mathcal{M}_{zy,\gamma\beta,cb}x_{y,\beta,b} = b_{z,\gamma,c}^{x,\alpha,a} \implies x_{y,\beta,b} = (\mathcal{M}^{-1})_{yz,\beta\gamma,bc}b_{z,\gamma,c}^{x,\alpha,a} = (\mathcal{M}^{-1})_{yx,\beta\alpha,ba}, \quad (1-116)$$

即只要能得到 x ，那么就能得到费米子矩阵逆的某一行。而费米子矩阵 \mathcal{M} 是一个只在近邻时空点有值的，极其稀疏的矩阵，计算一次矩阵向量乘法 $\mathcal{M}x$ 的时间相对较短，因此选用迭代法求解这样的线性方程组。这样的 b 被称为源向量 (source vector)，解向量 x 就是源 (x, α, a) 下的传播子， x 的坐标称为汇 (sink)。 $b^{x, \alpha, a}$ 是只在某个点有值的单位向量，我们也称之为点源 (point source)。回忆式 (1-106)，不难得到

$$C^{(2)}(t, 0; \vec{p}) = \sum_{\vec{y}} e^{-i\vec{p} \cdot \vec{y}} \|(\mathcal{M}^{-1})_{y0}\|^2, \quad (1-117)$$

通过求解线性方程组 $\mathcal{M}x = b^{0, \alpha, a}$, $\alpha \in \{1 \dots 4\}$, $a \in \{1 \dots 3\}$ ，共得到 $3 \times 4 = 12$ 个 $x^{0, \alpha, a}$ ，将它们的所有时空点上的元素取模平方并乘上相位因子后求和，就可以得到上式的两点关联函数。显然，这样的计算只使用了空间中的一个点 $\vec{x} = (0, 0, 0)$ 作为源，但是使用了所有的空间点 \vec{y} 作为汇。若是想取遍整个空间作为源以提高结果的信噪比，应当在整个空间体积 V 上分别设置相应的点源解线性方程组，使用上述流程得到结果后使用相位 $e^{-i\vec{p} \cdot \vec{x}}$ 线性叠加，

$$C_{\text{all}}^{(2)}(t, 0; \vec{p}) = \sum_{\vec{x}, \vec{y}} e^{-i\vec{p} \cdot (\vec{y} - \vec{x})} \|(\mathcal{M}^{-1})_{yx}\|^2, \quad (1-118)$$

但这样的操作显然非常昂贵，对于 $32^3 \times 64$ 的格子，仅仅对于某个初始时间 t_0 而言，就需要解 $32^3 = 32768$ 次线性方程组，这是不可接受的。

这时我们会采用体积源 (volume source) 来进行传播子求解。不同于点源仅在某个时空点被设置为 1，体积源被设置在某个特定时间 t_0 的所有空间格点上，

$$\left(b_{\text{wall}}^{\vec{p}, t_0, \alpha, a}\right)_{y, \beta, b} = e^{i\vec{p} \cdot \vec{x}} \delta_{t_0, y_4} \delta_{\alpha, \beta} \delta_{a, b}. \quad (1-119)$$

使用体积源得到的传播子是所有设置在时间 t 的点源传播子的线性叠加，系数为 $e^{i\vec{p} \cdot \vec{x}}$ 。这里有一种特殊的体积源，当 $\vec{p} = \vec{0}$ 时，所有点上的值均为 1，也被称为面源 (wall source)。仍然令 $x_4 = t_0 = 0$ ，首先我们分别对面源和动量为 \vec{p} 的体积源解 12 次线性方程组，有解向量 $x_{\text{volume}}^{\vec{0}, t_0, \alpha, a}$ 和 $x_{\text{volume}}^{\vec{p}, t_0, \alpha, a}$ ，如下操作

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha, a} \sum_{\vec{y}, t, \beta, b} e^{-i\vec{p} \cdot \vec{y}} \left(x_{\vec{y}, t, \beta, b}^{\vec{0}, t_0, \alpha, a}\right)^* x_{\vec{y}, t, \beta, b}^{\vec{p}, t_0, \alpha, a} \\ &= \sum_{\alpha, a} \sum_{\vec{y}, t, \beta, b} \sum_{\vec{x}', \vec{x}} e^{-i\vec{p} \cdot \vec{y}} e^{i\vec{p} \cdot \vec{x}} (\mathcal{M}^{-1})_{\vec{y}, t, \alpha, a; \vec{x}', 0, \beta, b}^\dagger (\mathcal{M}^{-1})_{\vec{y}, t, \beta, b; \vec{x}, 0, \alpha, a} \\ &= \sum_{\vec{y}} \sum_{\vec{x}} e^{-i\vec{p} \cdot \vec{y}} e^{i\vec{p} \cdot \vec{x}} \text{Tr} [\mathcal{M}_{y, x}^{-1 \dagger} \mathcal{M}_{y, x}^{-1}] + \sum_{\vec{y}} \sum_{\vec{x}' \neq \vec{x}} e^{-i\vec{p} \cdot \vec{y}} e^{i\vec{p} \cdot \vec{x}} \text{Tr} [\mathcal{M}_{y, x'}^{-1 \dagger} \mathcal{M}_{y, x}^{-1}] \\ &= \sum_{\vec{x}, \vec{y}} e^{-i\vec{p} \cdot \vec{y}} e^{i\vec{p} \cdot \vec{x}} \|(\mathcal{M}^{-1})_{yx}\|^2 + \sum_{\vec{y}} \sum_{\vec{x}' \neq \vec{x}} e^{-i\vec{p} \cdot \vec{y}} e^{i\vec{p} \cdot \vec{x}} \text{Tr} [\gamma_5 S(x', y) \gamma_5 S(y, x)], \end{aligned} \quad (1-120)$$

所有的共轭转置和取迹都作用在旋量和颜色指标。最后的结果分为两个部分，第一部分与 (1-118) 是相同的，我们来考察第二部分。这一部分括号内可以看成是

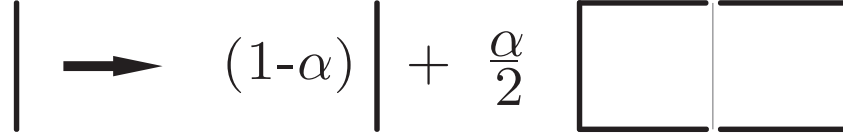


图 1-6 二维情形的 APE 涂摩示意图，来自综述 [2]

Figure 1-6 The principle of APE smearing displayed in the 2 dimensional case.

费米子从 x 传播到 y 再传播回 x' 的过程。由于 $x' \neq x$ ，意味着它不是规范不变的，因此可以期望在对组态做平均时，这一项会因为规范涨落的作用趋向于 0。这样我们通过了 24 次线性方程组求解得到了 (1-118)。考虑 (1-111)，

$$C_{\text{all}}^{(2)}(\vec{p}; t, 0) = \sum_x e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}} \sum_i \frac{e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}} |W^{(i)}|^2}{2E_{\pi}^{(i)}(\vec{p})} e^{-E_{\pi}^{(i)}(\vec{p})t} = \sum_i \frac{V |W^{(i)}|^2}{2E_{\pi}^{(i)}(\vec{p})} e^{-E_{\pi}^{(i)}(\vec{p})t}. \quad (1-121)$$

这表示通过体积源计算得到的关联函数将会比点源的结果多出一个体积因子 V 。

1.5.2 涂摩和蒸馏方法

1987 年, APE 合作组提出了对规范场进行一种他们称之为涂摩 (smearing) 的操作^[71]，其目的是试图尽可能地将非物理的短程扰动消除。对于规范链接 $U_{\mu}(x)$ ，通过如下方法计算一个新的规范链接 $U'_{\mu}(x)$ ：

$$U_{\mu}(x) + \epsilon \sum_{\nu \neq \mu} \left[U_{\nu}(x) U_{\mu}(x + \nu) U_{\nu}^{\dagger}(x + \mu) + U_{\nu}^{\dagger}(x - \nu) U_{\mu}(x - \nu) U_{\nu}(x - \nu + \mu) \right]. \quad (1-122)$$

上述结果还需要投影到 SU(3) 上保证规范链接的性质，其中 ϵ 是涂摩参数，表征了本次涂摩的强度。这种涂摩方案也称为 APE 涂摩 (APE smearing)。这一步骤可以迭代地进行数次，最后得到一个新的规范组态用以进行后续的计算。注意上式中的后一项，它们看起来就像是一些头尾固定在某个线段两端的订书钉 (staple)，二维情形的示意图见图 1-6，此时对于每个规范链接有两个订书钉存在。因此也被如此称呼。这一步骤的实质是将规范链接和相邻的一些规范链接做平均，可以期待它会压低一些短程的贡献。文章论证了，在连续极限下，取迭代次数 s 很大和涂摩参数 ϵ 很小，在固定 $\tau = s\epsilon$ 时，其具体效果类似于使得规范不变算符按照 $e^{-\tau k^2}$ 压低，其中 k 是算符产生的态的动量，即高动量的胶子态贡献会被压低（若 τ 很大）。

至于规范链接的涂摩操作在费米子作用量中的应用，起初是在对交错作用量的改进中引入的^[72]，作者称这些经过涂摩的规范链接为胖链接 (fat link)，之后人们引入了不同的涂摩方案来构造胖链接^[73-76]。使用胖链接的方法同样被应用到了四叶草作用量中^[77-81]，而目前在四叶草作用量中比较流行的方案有超立方涂摩 (hypercubic smearing, HYP smearing)^[74, 82]，茁壮链接/指数涂摩 (stout-link smearing, stout smearing, EXP smearing)^[83-84] 和超立方嵌套的指数涂摩 (hypercubically nested EXP smearing, HEX smearing)^[85]。

另外，也可以对源/汇进行涂摩，它的物理含义是明确的。回忆介子两点关联函数式 (1-111)，位于源点的算符 $\mathcal{O}^\dagger(\vec{x}, 0)$ 的目的是在 $(\vec{x}, 0)$ 的位置上产生一个特定量子数的粒子。Thomas A. DeGrand 和 Richard D. Loft 在 1991 年指出^[86]，这样的介子算符很难产生我们想要的强子态，特别是在较轻的夸克质量或较小的格距下。这是因为最轻的强子基态有大约 1 fm 的特征尺度，显然无法被通常只有 0.1 fm 格距的格点上的一个点描述。将介子算符写成更一般的形式，

$$\mathcal{O}(\vec{x}, t) = \sum_{\vec{y}, \vec{z}} \Phi(\vec{x}; \vec{y}, \vec{z}) \bar{q}(\vec{z}, t) \Gamma q(\vec{y}, t). \quad (1-123)$$

显然点源对应的 $\Phi(\vec{x}; \vec{y}, \vec{z}) = \delta(\vec{x} - \vec{y})\delta(\vec{x} - \vec{z})$ 。为了将介子算符从一个点扩展到一定的范围内，DeGrand 和 Loft 提议了一种“壳模型”的形式 $\Phi(\vec{x}; \vec{y}, \vec{z}) = \varphi(\vec{x}, \vec{y})\varphi(\vec{x}, \vec{z})$ ，依照函数 φ 的形式将夸克场从某一点弥散到一定区域内（夸克的特征尺度 R ），他们提供了一种类似于 Gaussian 分布的形式进行计算，

$$\varphi_R(\vec{x}, \vec{x}') = e^{-|\vec{x}' - \vec{x}|/R|^2}. \quad (1-124)$$

\vec{r} 是某个坐标与夸克场中心位置 \vec{x} 的差。可以对源/汇应用这样的操作，那么夸克传播子变为

$$S(\vec{x}, t; \vec{y}, 0) \rightarrow \sum_{\vec{x}', \vec{y}'} \varphi_R(\vec{x}, \vec{x}' - \vec{x}) S(\vec{x}', t; \vec{y}', 0) \varphi_R(\vec{y}, \vec{y}' - \vec{y}). \quad (1-125)$$

这便是所谓的 Gaussian 涂摩。一般而言，我们不会对汇做 Gaussian 涂摩，这意味着只需要将点源 $b^{\vec{x}, t, \alpha, a}$ 替换为

$$(b_{\text{Gaussian}}^{\vec{x}, t, \alpha, a})_{\vec{y}, t', \beta, b} = \varphi_R(\vec{x}, \vec{y} - \vec{x}) \delta_{t, t'} \delta_{\alpha, \beta} \delta_{a, b}, \quad (1-126)$$

再重复上一小节提到的对点源的具体操作即可。这样的源向量也称为 Gaussian 源，或者壳源（shell source），它通常可以压低介子激发态的贡献，相应能够提高获取的介子基态信噪比。特别的，当 $R \rightarrow \infty$ 时，Gaussian 源会变为面源。对于函数 φ_R ，通常称为涂摩函数，它也可以取其他的形式，在后文中将以 φ 标记。

在需要构造大量强子算符计算关联函数时，蒸馏方法（distillation）^[87] 是一种比较有竞争力的涂摩方案。考虑动量空间的涂摩函数 $\tilde{\varphi} = e^{-\sigma k^2}$ ，可以期待这种形式的涂摩函数将会压低高动量态的贡献。换算到坐标空间上， $\varphi = e^{\sigma \nabla^2}$ ，其中 $-\nabla^2 = -\sum_{i=1}^3 \nabla_i^2$ 为格点空间方向的 Laplace 算符（Laplacian），其矩阵形式为：

$$-[\nabla^2(t)]_{xy} = 6\delta_{x,y} - \sum_{i=1}^3 [U_i(x, t)\delta_{x+i,y} + U_i^\dagger(x-i, t)\delta_{x-i,y}]. \quad (1-127)$$

由于需要使用规范协变的差分算符，因此 Laplace 算符是定义在某个特定的时间 t 上的，并且不难验证上式的矩阵是 Hermitian 矩阵。对于某个时间 t ，构造并求解 Laplace 算符的本征系统，得到本征值 $\lambda_1 \dots \lambda_M$ 以及对应归一化的本征向量 v_1, \dots, v_M ，

$$-\nabla^2(t)v_i = \lambda_i v_i, \quad \sum_k (v_i)_k (v_j^*)_k = \delta_{i,j}. \quad (1-128)$$

$M = L_x \times L_y \times L_z \times N_c$ 是 Laplace 算符理论上的本征值数量, Hermitian 矩阵的本征值都是实数, 那么不妨令本征值按升序排列 $\lambda_i < \lambda_{i+1}$ 。本征值构成的对角矩阵为 Λ , 相应的相似变换矩阵为 P , 其第 i 列都是对应的本征向量 v_i , 由于 Hermitian 矩阵是正规的, 那么 $P^{-1} = P^\dagger$ 。显然有

$$-\nabla^2(t) = P\Lambda P^{-1}, \implies e^{\sigma\nabla^2} = P e^{-\sigma\Lambda} P^{-1}, \quad (1-129)$$

$$\implies (e^{\sigma\nabla^2(t)})_{xy} = \sum_{k=1}^M e^{-\sigma\lambda_k} P_{xk} P_{yk}^* = \sum_{k=1}^M e^{-\sigma\lambda_k} (v_k)_x (v_k^*)_y. \quad (1-130)$$

此时对上式中的 $e^{-\sigma\lambda_k}$ 做二值化: 大于某个值的近似为 1, 小于某个值的近似为 0。这意味着舍弃求和中大于某个阈值 K 的所有 k 。现在取 P 矩阵的前 K 列为 $V^{(t,K)}$,

$$e^{\sigma\nabla^2(t)} \approx V^{(t,K)} V^{(t,K)\dagger}. \quad (1-131)$$

得到了一个使用本征系统构造的对涂摩算符的粗略估计。涂摩参数 σ 大约随着 K 增大而减小 (因为更多的 $e^{-\sigma\lambda_k}$ 被近似为 1), 特别的当 $K = M$ 时, 涂摩算符回到 $\delta_{x,y}$ 的形式 (点源)。另外显然有 $V^{(t,K)\dagger} V^{(t,K)} = \mathbb{1}_{K \times K}$ 。

这样构造涂摩算符的好处是明显的。考虑对源和汇均作涂摩的夸克传播子

$$S_K(\vec{x}, t; \vec{y}, 0) = \sum_{\vec{x}', \vec{y}'} [V^{(t,K)} V^{(t,K)\dagger}]_{\vec{x}\vec{x}'} S(\vec{x}', t; \vec{y}', 0) [V^{(0,K)} V^{(0,K)\dagger}]_{\vec{y}'\vec{y}}. \quad (1-132)$$

其中颜色指标按照一般的矩阵乘法规则计算。用费米子矩阵的逆替换掉传播子,

$$S_K(\vec{x}, t; \vec{y}, 0) = \left[V^{(t,K)} V^{(t,K)\dagger} (\mathcal{M}^{-1})_{t,0} V^{(0,K)} V^{(0,K)\dagger} \right]_{xy}. \quad (1-133)$$

未显式写出的指标按矩阵乘法规则计算。加入内插场算符并计算两点关联函数,

$$C^{(2)}(t, 0) = \sum_{\vec{x}, \vec{y}} \text{Tr} [S_K(\vec{y}, 0; \vec{x}, t) \Gamma_{\text{sink}} S_K(\vec{x}, t; \vec{y}, 0) \Gamma_{\text{source}}], \quad (1-134)$$

将方括号中内容展开,

$$\begin{aligned} & V^{(0,K)} V^{(0,K)\dagger} (\mathcal{M}^{-1})_{0,t} V^{(t,K)} V^{(t,K)\dagger} \Gamma_{\text{sink}} \\ & \times V^{(t,K)} V^{(t,K)\dagger} (\mathcal{M}^{-1})_{t,0} V^{(0,K)} V^{(0,K)\dagger} \Gamma_{\text{source}}. \end{aligned} \quad (1-135)$$

定义馏分传播子 (perambulator) $\tau^{(K)}(t, 0) = V^{(t,K)\dagger} (\mathcal{M}^{-1})_{t,0} V^{(0,K)}$, 定义元算符 (elemental) $\phi^{(K)}(t, \Gamma) = V^{(t,K)\dagger} \Gamma V^{(t,K)}$,

$$C^{(2)}(t, 0) = \tau^{(K)}(0, t) \phi^{(K)}(t, \Gamma_{\text{sink}}) \tau^{(K)}(t, 0) \phi^{(K)}(0, \Gamma_{\text{source}}). \quad (1-136)$$

之后我们省略上标中的 (K) , 显然馏分传播子和元算符的计算是相互独立的。元算符的计算仅仅涉及到矩阵乘法, 并不非常消耗性能, 这使得通过内插场算符构造强子算符变得非常方便: 对于不同的强子算符, 不需要重新求解线性方程组 $\mathcal{M}x = b$ 。但是作为代价, 馏分传播子则需要大量的计算, 考虑一个 $\tau(t, 0)$, 需要对 V 中的每一列求解 4 次 (来源于 Dirac 指标) 线性方程组。强子谱计算, 特别是激发态强子谱计算需要构造很多算符求解一般本征值问题, 蒸馏方法极大降低了引入更多算符的代价, 使得更精确的谱学计算成为可能。

1.5.3 迭代求解器

求解 $\mathcal{M}x = b$ 的过程在格点 QCD 研究中是最为重要的一步，通常也是整个流程中最耗时的部分。考虑一个更普遍的情形 $Ax = b$, $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, $x, b \in \mathbb{C}^n$ 。当 n 很大并且 A 是稀疏矩阵时，这样的求解通常考虑 Krylov 子空间方法，其核心是在维数较小的子空间中寻找方程的近似解^[88]。在这种方法中，我们使用 $r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$ 标记残差，特别的， $x^{(0)}$ 是解的初始估计， $r^{(0)}$ 为初始残差。取

$$K_m[A, r^{(0)}] = \text{span} \{r^{(0)}, Ar^{(0)}, \dots, A^{m-1}r^{(0)}\}, \quad (1-137)$$

这就是一个 m 维的 Krylov 子空间，目标转换为在仿射空间 $x^{(0)} + K_m$ 寻找原方程的近似解 $x^{(m)}$ 。由于此时有 m 个自由度，需要添加 m 个约束，有 Petrov-Galerkin 条件

$$L_m \perp r^{(m)} = b - Ax^{(m)}. \quad (1-138)$$

由于 $x^{(m)} = x^{(0)} + \hat{x}^{(m)}$, $\hat{x}^{(m)} \in K_m$ ，显然 $L_m \perp r^{(0)} - A\hat{x}^{(m)}$ ，与之前的形式是一样的，因此不妨令 $x^{(0)} = 0$ ，所有的 $r^{(0)}$ 变为 b ，不会影响我们的讨论。

设 $V = [v_1 \dots, v_m]$ 和 $U = [u_1, \dots, u_m]$ 分别是 K_m 和 L_m 的一组基列向量构成的矩阵，显然的应该存在 $y \in \mathbb{C}^m$ 使

$$x^{(m)} = Vy, U \perp b - Ax^{(m)} \implies U^\dagger(b - AVy) = 0. \quad (1-139)$$

容易得到，当

(1) A 正定且 $L_m = K_m$ ，或

(2) A 可逆且 $L_m = AK_m$

时， $U^\dagger AV$ 的逆存在^[88]，

$$x^{(m)} = Vy = V(U^\dagger AV)^{-1}U^\dagger b. \quad (1-140)$$

当然， L_m 在不同条件下还有更多可能的取值，此处不一一列举。对我们而言，比较常用的 Krylov 子空间方法有

(1) 共轭梯度法 (Conjugate gradient, CG)^[89]，有 $L_m = K_m(A, b)$ ，需要 A 是 Hermitian 矩阵，并且正定。

(2) 最小残差法 (Minimal residual, MINRES, MR)^[90]，有 $L_m = AK_m(A, b)$ 。它的实现最简单，空间占用最小。

(3) 双共轭梯度法 (Biconjugate gradient, BiCG)^[91]，有 $L_m = K_m(A^\dagger, b)$ ，在 A 为 Hermitian 矩阵时退化到 CG。

(4) 稳定双共轭梯度法 (Biconjugate gradient stablized, BiCGSTAB)^[92]，是对 BiCG 不稳定收敛问题的改进。

现在让我们具体讨论 CG 算法的实现^[93]。首先有 $L_m = K_m(A, b)$ ，令 $\{p^{(k)}, k < m\}$ 是 $K_m(A, b)$ 空间的一系列向量。正交条件需要满足 $p^{(k)} \perp r^{(m)}$, $r^{(k)} \perp r^{(m)}$ 对

算法 1 Conjugate gradient

```

1: procedure CG( $A, b$ ) ▷ Solve  $Ax = b$  by CG
2:    $x \leftarrow 0$ 
3:    $r \leftarrow b - Ax$ 
4:   If converge return  $x$ 
5:    $p \leftarrow r$ 
6:   while not reach max iteration do
7:      $\alpha \leftarrow \frac{\langle r, r \rangle}{\langle p, Ap \rangle}$ 
8:      $x \leftarrow x + \alpha p$ 
9:      $r' \leftarrow r - \alpha Ap$ 
10:    If converge return  $x$ 
11:     $\beta \leftarrow \frac{\langle r', r' \rangle}{\langle r, r \rangle}$ 
12:     $p \leftarrow r' + \beta p$ 
13:     $r \leftarrow r'$ 
14:  end while
15: end procedure
    
```

任意 $k < m$ 成立。定义系数 a_i ,

$$x^k = \sum_{i=0}^{k-1} a_i p^{(i)}, \Rightarrow r^{(k+1)} - r^{(k)} = -A a_k p^{(k)}, \quad (1-141)$$

保证 $x^{(k)}$ 在 Krylov 子空间 $K_k(b, A)$ 中。定义关于 A 的内积 $\langle a, b \rangle_A = a^\dagger A b$ (这需要 A 是 Hermitian 矩阵, 并且正定)。 $\{r^{(k)}, k < m\}, \{p^{(k)}, k < m\}$ 都应当张成 $K_m(A, b)$, 不妨令 $\{p^{(k)}\}$ 关于 A 正交, 那么根据 Gram-Schmidt 正交化,

$$p^{(m)} = r^{(m)} - \sum_{i=0}^{m-1} \frac{p^{(i)\dagger} A r^{(m)}}{p^{(i)\dagger} A p^{(i)}} p^{(i)}, \Rightarrow r^{(m)\dagger} A p^{(k)} = \frac{1}{a_k} [r^{(m)\dagger} r^{(k)} - r^{(m)\dagger} r^{(k+1)}] \quad (1-142)$$

$$\Rightarrow \sum_{i=0}^{m-1} \frac{p^{(i)\dagger} A r^{(m)}}{p^{(i)\dagger} A p^{(i)}} p^{(i)} = -\frac{1}{a_k} \frac{r^{(m)\dagger} r^{(m)}}{p^{(m-1)\dagger} A p^{(m-1)}} p^{(m-1)}, \quad (1-143)$$

$$\Rightarrow p^{(m)} = r^{(m)} + \frac{1}{a_k} \frac{r^{(m)\dagger} r^{(m)}}{p^{(m-1)\dagger} A p^{(m-1)}} p^{(m-1)} = r^{(m)} + b_{m-1} p^{(m-1)}. \quad (1-144)$$

再使用 $\{r^{(i)}\}$ 是一组正交基的条件求解 a_m ,

$$r^{(m+1)} - r^{(m)} = -A a_m p^{(m)} \Rightarrow r^{(m)\dagger} r^{(m)} = a_k r^{(m)\dagger} A p^{(m)} = a_k p^{(m)\dagger} A p^{(m)}. \quad (1-145)$$

最后一个等号使用了 1-144 和 $\{p^{(k)}\}$ 关于 A 正交。那么我们有系数

$$a_k = \frac{r^{(k)\dagger} r^{(k)}}{p^{(k)\dagger} A p^{(k)}}, \quad b_k = \frac{1}{a_k} \frac{r^{(k+1)\dagger} r^{(k+1)}}{p^{(k)\dagger} A p^{(k)}} = \frac{r^{(k+1)\dagger} r^{(k+1)}}{r^{(k)\dagger} r^{(k)}}. \quad (1-146)$$

将这些系数代回, 我们得到了 CG 算法的具体流程算法 1。类似的, 我们可以得到 BiCG 算法的流程算法 2。若 A 是 Hermitian 矩阵, 显然 BiCG 将会给出与 CG

算法 2 Bionjugate gradient

1: **procedure** BiCG(A, b) ▷ Solve $Ax = b$ by BiCG
2: $x, \bar{x} \leftarrow 0, 0$
3: $r, \bar{r} \leftarrow b - Ax, b - A^\dagger \bar{x}$
4: If converge return x
5: $p, \bar{p} \leftarrow r, \bar{r}$
6: **while** not reach max iteration **do**
7: $\alpha \leftarrow \frac{\langle \bar{r}, r \rangle}{\langle \bar{p}, Ap \rangle}$
8: $x, \bar{x} \leftarrow x + \alpha p, \bar{x} + \alpha \bar{p}$
9: $r', \bar{r}' \leftarrow r - \alpha Ap, \bar{r} - \alpha A^\dagger \bar{p}$
10: If converge return x
11: $\beta \leftarrow \frac{\langle r', r' \rangle}{\langle r, r \rangle}$
12: $p, \bar{p} \leftarrow r' + \beta p, \bar{r}' + \beta \bar{p}$
13: $r, \bar{r} \leftarrow r', \bar{r}'$
14: **end while**
15: **end procedure**

算法 3 Biconjugate gradient stablized

1: **procedure** BiCGSTAB(A, b) ▷ Solve $Ax = b$ by BiCGSTAB
2: $x \leftarrow 0$
3: $r \leftarrow r_0 \leftarrow b - Ax$
4: If converge return x
5: $p \leftarrow r$
6: **while** not reach max iteration **do**
7: $\alpha \leftarrow \frac{\langle r_0, r \rangle}{\langle r_0, Ap \rangle}$
8: $x \leftarrow x + \alpha p$
9: $r' \leftarrow r - \alpha Ap$
10: If converge return x
11: $t \leftarrow Ar$
12: $\omega \leftarrow \frac{\langle t, r \rangle}{\langle t, t \rangle}$
13: $x \leftarrow x + \omega r'$
14: $r' \leftarrow r' - \omega Ar'$
15: If converge return x
16: $\beta \leftarrow \frac{\langle r', r' \rangle}{\langle r, r \rangle}$
17: $p \leftarrow r' + (\alpha\beta/\omega)p - \alpha\beta Ap$
18: $r \leftarrow r'$
19: **end while**
20: **end procedure**

算法完全相同的结果，但程序需要额外重复一次计算。BiCG 算法需要计算 $A^\dagger x$ ，且收敛并不稳定，因此实践中通常采用 BiCGSTAB 进行夸克传播子的求解，这种算法在格点研究中被证明是有效的^[94]。BiCGSTAB 需要计算一个额外的系数，每一次迭代会更新两次近似值，详见算法 3。

最后简单介绍多重网格 (multigrid, MG) 算法^[95], 相比之前提到的迭代求解器它拥有极快的收敛速度, 但需要大量的时间产生辅助数据。多重网格算法的设计基于这样一个事实, 迭代求解器往往可以很快消除误差中的高频分量, 而对低频分量的消除则慢得多。那么可以人为构造一个粗网格, 在这个粗网格上可以有效对误差的低频分量进行消除, 从而提高整体的运行效率。MG 有非常多的变种, 格点 QCD 领域现有使用了 MG 的软件有 mg_proto^[96], QUDA^[97], Grid^[98] 等, 它们具体实现了一种基于聚合的域分解代数多重网格 (aggregation-based domain decomposition multigrid, DD- α AMG)。具体各个作用量的实现过程可以参考 QUDA 的开发过程^[99-103]。

1.5.4 奇偶预处理

以 CG 为例, 我们来估计算法的收敛速度^[93]。这时 A 有好的性质 (Hermitian, 正定), 设每一步迭代有对真实解的偏差 $e^{(k)} = x^{(k)} - x$,

$$r^{(k)} = b - Ax^{(k)} = b - Ax - Ae^{(k)} = -Ae^{(k)}. \quad (1-147)$$

$$K_m(A, b) = K_m[r^{(0)}, A] = K_m[Ae^{(0)}, A]. \quad (1-148)$$

$$e^{(k+1)} - e^{(k)} = a_k p^{(k)}. \quad (1-149)$$

从第三个等式不难看到, $e^{(k)} \in e^{(0)} + K_m[Ae^{(0)}, A]$, 那么可以将 $e^{(k)}$ 表达为 A 的多项式作用在 $e^{(0)}$ 上, 即

$$e^{(k)} = P_k(A)e^{(0)}. \quad (1-150)$$

多项式记号 P 的下标指示了最高次项, 同时这种多项式还应有性质 $P_k(0) = 1$, 因为是在 $e^{(0)} + K_m[Ae^{(0)}, A]$ 中取值。将 $e^{(0)}$ 展开为 A 的本征向量 v_i 的线性组合, 组合系数为 c_i , 对应的本征值为 λ_i 。显然本征向量应该有 n 个。

$$e^{(0)} = \sum_{i=1}^n c_i v_i, \Rightarrow e^{(k)} = \sum_{i=1}^n P_k(A) c_i v_i = \sum_{i=1}^n c_i P_k(\lambda_i) v_i, \quad (1-151)$$

$$\frac{e^{(k)\dagger} A e^{(k)}}{e^{(0)\dagger} A e^{(0)}} = \frac{\sum_{i=1}^n c_i^2 P_k^2(\lambda_i) \lambda_i}{\sum_{i=1}^n c_i^2 \lambda_i}. \quad (1-152)$$

P_k 其实是 CG 算法搜索得到的多项式, 它使得 $e^{(k)\dagger} A e^{(k)}$ 在每一个 k 时保持最小。考虑收敛性最差的谱结构,

$$\frac{\sum_{i=1}^n c_i^2 P_k^2(\lambda_i) \lambda_i}{\sum_{i=1}^n c_i^2 \lambda_i} \leq \frac{\max_{\lambda \in [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]} P_k^2(\lambda) \sum_{i=1}^n c_i^2 \lambda_i}{\sum_{i=1}^n c_i^2 \lambda_i} = \max_{\lambda \in [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]} P_k^2(\lambda). \quad (1-153)$$

上式使用了正定性, 使得不等号方向一致, 公因子可以提出。可见收敛速度下限与多项式 $P_k(\lambda_i)$ 直接相关。引入 Chebyshev 多项式

$$T_k(x) = \frac{1}{2} \left[\left(x + \sqrt{x^2 - 1} \right)^k + \left(x - \sqrt{x^2 - 1} \right)^k \right], \quad (1-154)$$

在 $|x| < 1$ 时, $|T_k(x)| \leq 1$, 且所有零点都在这个范围内。构造

$$P'_k(\lambda) = \frac{T_k\left(\frac{\lambda_{\max} + \lambda_{\min} - 2\lambda}{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}}\right)}{T_k\left(\frac{\lambda_{\max} + \lambda_{\min}}{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}}\right)}, \quad (1-155)$$

显然当 $\lambda \in [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$, 分子参数范围在 $[-1, 1]$ 上, 整个表达式值域绝对值 $< T_k^{-1}\left(\frac{\lambda_{\max} + \lambda_{\min}}{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}}\right)$ 。若存在一个更“好”的多项式, 即在 $\lambda \in [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]$ 范围中有更小的值域上限, 这意味着它与 P'_k 在此区间内有 k 个交点。因为这类多项式还应满足一个条件 $P_k(0) = 1$, 这样两个多项式还在 $\lambda = 0$ 处有一个交点, 这不可能是两个最高次为 k 的多项式的结果。

我们现在可以用 λ_{\min} 和 λ_{\max} 来表达 CG 算法的收敛速度上限。

$$\begin{aligned} \frac{e^{(k)\dagger} A e^{(k)}}{e^{(0)\dagger} A e^{(0)}} &\leq \max_{\lambda \in [\lambda_{\min}, \lambda_{\max}]} P_k^2(\lambda) = T_k^{-1}\left(\frac{\lambda_{\max} + \lambda_{\min}}{\lambda_{\max} - \lambda_{\min}}\right) \\ &= 2 \left[\left(\frac{\sqrt{\kappa} + 1}{\sqrt{\kappa} - 1} \right)^k + \left(\frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1} \right)^k \right]^{-1} \\ &\approx 2 \left[\left(\frac{\sqrt{\kappa} + 1}{\sqrt{\kappa} - 1} \right)^k \right]^{-1} = 2 \left(\frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1} \right)^k \end{aligned} \quad (1-156)$$

约等于号考虑当 k 很大时分母主要由 $\frac{\sqrt{\kappa}+1}{\sqrt{\kappa}-1}$ 项贡献, 其中 $\kappa(\mathcal{M}) = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}$ 被称为条件数 (Condition number)。上式说明随着 $\kappa(\mathcal{M})$ 增长, CG 算法收敛的速度会逐渐降低。对于其他算法, 具体的分析过程可能不尽相同, 但最后的结论基本都趋向于当条件数增大时, 迭代求解器的收敛速度就会变慢。

考虑一个自由的 Wilson 费米子作用在平面波 $e^{-ip \cdot x}$ 上

$$\begin{aligned} \mathcal{M} e^{-ip \cdot x} &= m_0 + \sum_{\mu} \left[\frac{1}{2} \gamma_{\mu} \nabla_{\mu} - \frac{a}{2} \Delta_{\mu} \right] e^{-ip \cdot x} \\ &= m_0 + \sum_{\mu} \left\{ -\frac{i}{a} \gamma_{\mu} \sin(p_{\mu} a) + \frac{1}{a} [1 - \cos(p_{\mu} a)] \right\} e^{-ip \cdot x}. \end{aligned} \quad (1-157)$$

则本征值对应 p_{μ} 的取值范围。这些本征值不是实数, 可以考察 $\sqrt{\mathcal{M}^{\dagger} \mathcal{M}}$, 基本上有

$$\lambda_{\max} = m_0 + \frac{8}{a}, \quad \lambda_{\min} = m_0 \implies \kappa(\mathcal{M}) = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} = 1 + \frac{8}{m_0 a}. \quad (1-158)$$

特别的, 对于对角归一化的费米子矩阵 $2\kappa a_t \mathcal{M}$,

$$\lambda_{\max} = \frac{m_0 a + 8}{m_0 a + 4}, \quad \lambda_{\min} = \frac{m_0 a}{m_0 a + 4}. \quad (1-159)$$

这意味着当裸夸克质量 $m_0 a$ 减小时, 求解器的收敛速度将会下降甚至发散, 因此对于轻夸克往往需要使用额外的手段使求解器重新收敛。这时我们会引入预

处理 (precondition)。例如 Yoshio Oyanage 尝试使用 LDU 分解^[104], P. Rossi 等人尝试使用 Fourier 加速^[105] 对线性方程组进行预处理。这些预处理的实现原理不尽相同, 而现在格点上经常对费米子矩阵进行 Thomas A. DeGrand 引入的奇偶预处理 (even-odd precondition)^[106-107], 它的有效性则是靠降低了矩阵的条件数来保证。

现在我们来尝试应用奇偶预处理^[106]。根据费米子矩阵的具体形式 (1-86), 可以知道仅当时空指标相等或相差为 1 时矩阵元不为零。现在考虑将时空指标分成奇偶两部分,

$$\begin{aligned} e &= \{(x, y, z, t), x + y + z + t \equiv 0(\text{mod } 2)\}, \\ o &= \{(x, y, z, t), x + y + z + t \equiv 1(\text{mod } 2)\}. \end{aligned} \quad (1-160)$$

自然的, 可以将费米子矩阵按照行列指标的奇偶性拆成四个部分,

$$2\kappa a_t \mathcal{M}_{xy} = \begin{pmatrix} M_{ee} & M_{eo} \\ M_{oe} & M_{oo} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - \kappa T_{ee} & -\kappa D_{eo} \\ -\kappa D_{oe} & 1 - \kappa T_{oo} \end{pmatrix}, \quad (1-161)$$

$$T_{xy} = \left[c_{\text{SW}}^t \sum_i \sigma_{i4} \hat{F}_{i4} + \frac{c_{\text{SW}}^s}{\xi_0} \sum_{i < j} \sigma_{ij} \hat{F}_{ij} \right] \delta_{x,y}, \quad (1-162)$$

$$\begin{aligned} D_{xy} &= [(1 - \gamma_4)U_4(x)\delta_{x+\hat{4},y} + (1 + \gamma_4)U_4(x - \hat{4})\delta_{x-\hat{4},y}] \\ &+ \frac{\nu}{\xi_0} \sum_i [(1 - \gamma_i)U_i(x)\delta_{x+i,y} + (1 + \gamma_i)U_i(x - i)\delta_{x-i,y}]. \end{aligned} \quad (1-163)$$

那么 D 就是 Wilson 作用量的非对角部分, T 就是四叶草部分。在实践中, 我们称呼这里的 D 矩阵为 Dslash。现在对上述分离成四部分的矩阵进行 LDU 分解, 定义 $A = 1 + T$,

$$\begin{pmatrix} A_{ee} & -\kappa D_{eo} \\ -\kappa D_{oe} & A_{oo} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\kappa D_{oe} A_{ee}^{-1} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{ee} & 0 \\ 0 & A_{oo} - \kappa^2 D_{oe} A_{ee}^{-1} D_{eo} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -\kappa A_{ee}^{-1} D_{eo} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (1-164)$$

左边下三角矩阵的逆可以轻松得到,

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\kappa D_{oe} A_{ee}^{-1} & 1 \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \kappa D_{oe} A_{ee}^{-1} & 1 \end{pmatrix}. \quad (1-165)$$

考虑将 x 和 b 也分成奇偶两部分, 初始的线性方程组 $\mathcal{M}x = b$ 变为

$$\begin{cases} A_{ee}x_e - \kappa D_{eo}x_o = b_e, \\ (A_{oo} - \kappa^2 D_{oe} A_{ee}^{-1} D_{eo})x_o = \kappa D_{oe} A_{ee}^{-1} b_e + b_o. \end{cases} \quad (1-166)$$

由于 A 关于时空指标是对角的, 它的逆矩阵就是对每个对角部分求逆。而这些对角元是一个颜色指标上复矩阵 (四叶草是小方格的线性组合) 和 Dirac 指标上

单位矩阵的直乘。这样一个矩阵求逆是容易的，因为仅需要对这些 3×3 的复矩阵求逆即可。那么上式中唯一非平庸的部分就变成了求解第二行的线性方程组，有新的矩阵 $A_{oo} - \kappa^2 D_{oe} A_{ee}^{-1} D_{eo}$ ，显然线性系统的规模缩减为了原来的一半，虽然矩阵向量乘次数更多，但总计算量并没有增加。仍然考虑一个自由的 Wilson 作用量，那么 A 退化为单位矩阵，假设有本征谱 $\mathcal{M}v = \lambda v$ ，

$$v_e - \kappa D_{eo} v_o = \lambda v_e, \quad v_o - \kappa D_{oe} v_e = \lambda v_o, \quad (1-167)$$

$$\Rightarrow (1 - \kappa^2 D_{oe} D_{eo}) v_o = v_o + \kappa D_{oe} (\lambda - 1) v_e = [1 - (\lambda - 1)^2] v_o. \quad (1-168)$$

即这个矩阵有新的本征值 $\lambda' = \lambda(2 - \lambda)$ ，条件数变为

$$\kappa(1 - \kappa^2 D_{oe} D_{eo}) = \frac{\lambda'_{\max}}{\lambda'_{\min}} = \frac{(m_0 a + 4)^2}{m_0 a(m_0 a + 8)} = 1 + \frac{16}{m_0 a(m_0 a + 8)}. \quad (1-169)$$

与不使用奇偶预处理的费米子矩阵条件数 (1-158) 相比，在同样的裸质量 $m_0 a$ 下，

$$\kappa(\mathcal{M}) - \kappa(1 - \kappa^2 D_{oe} D_{eo}) = \frac{6}{m_0 a} + \frac{2}{m_0 + 8} > 0. \quad (1-170)$$

可以看到，奇偶预处理确实降低了线性系统的条件数。上面的推导基于一个自由的 Wilson 费米子，更一般的情况会复杂的多，但结论基本适用。

奇偶预处理中的 LDU 分解并不是唯一的。上文中介绍的是奇奇非对称的形式。偶偶非对称形式会使式 (1-164) 分解中间项对角变为 $A_{ee} - \kappa^2 D_{eo} A_{oo}^{-1} D_{oe}$ 和 A_{oo} ，自然左右两侧的三角矩阵也需要做相应的改变。另外还有奇奇对称形式和偶偶对称形式，以前者为例，分解结果为

$$\begin{pmatrix} A_{ee} & 0 \\ -\kappa D_{oe} & A_{oo} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 - \kappa^2 A_{oo}^{-1} D_{oe} A_{ee}^{-1} D_{eo} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -\kappa A_{ee}^{-1} D_{eo} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (1-171)$$

这时中间对角项有一个变成了单位矩阵。

1.6 误差分析

由于格点 QCD 是建立在一个离散化的欧氏时空格点上的，因此天然地会使得格点场论含有一些系统误差。由于采用了 Markov 链 Monte Carlo (Markov chain Monte Carlo, MCMC) 方法在系综空间中采样，会引入统计误差。本节将会简单介绍主要的系统误差来源，以及两类误差的处理手段。需要特别指出的是，格点 QCD 是目前唯一能够控制这些误差并给出足够精确结果的非微扰方法。

1.6.1 系统误差

(1) 连续极限：格点 QCD 在一个特定格距 a 下模拟得到物理量的结果，由于格点作用量会与连续情形下有一定偏离（通常是 $\mathcal{O}(a^2)$ 阶的），这些偏离会在连续极限 $a \rightarrow 0$ 时消失，意味着格点上的场论回到连续时空中的形式。格点

QCD 作用量的改进大体上都试图将偏离减小到格距的更高阶，这意味着这些作用量是对连续理论更好的近似。但这样的偏离终究无法消除，还是需要采用连续外推的手段消除格距的影响。通常而言，我们会在多个不同格距的格点上计算同一个物理量，采用相应多项式形式对这些数据点对格距的关系进行拟合，并外推到 $a = 0$ 的连续极限。

(2) 无穷体积极限：理论上对欧式时空离散化得到的应当是一个体积为无穷的格点，但是实际计算只能在一个有限的格点上进行，这会引入对场论的额外偏离。定义时间方向格点数 L_t 和空间方向格点数 L_s ，通常物理可观测量（关联函数）在时间方向上获得，因此我们会设置 $L_t \geq 2L_s$ 的格点使得关联函数能够传播更远的距离，从而消除短时间的大量高激发态影响，这样有限体积效应也主要由 L_s 限制。M. Lüscher 详细讨论了有限体积对于能谱的影响^[108-109]，对于初末态只有一个强子的情形，他证明了有限体积效应与格点体积的关系大约是 $e^{-m_\pi a_s L_s}$ 量级，其中 m_π 是相应的 π 介子质量。当 $m_\pi a_s L_s \gtrsim 4$ 时，有限体积效应 $\lesssim 2\%$ ，我们便认为基本没有影响。以物理的 π 介子质量 135 MeV 为例，相应的空间方向长度 $a_s L_s$ 需要达到 $\gtrsim 6$ fm，这是一个相当大的体积。当初末态包含多个强子时，有限体积效应还会有额外的幂次项，使得估计更加困难。更系统的解决方案与连续极限外推相似，我们会在多个不同体积的格点上计算同一个物理量，外推到 $L_s \rightarrow \infty$ 的无穷体积极限（例如上述的 π 介子质量）。对于没有明确有限体积效应表达式的物理量，则通过这些不同的结果直接给出一个误差估计。

(3) 手征外推：在前文中提到，随着夸克质量参数降低，迭代求解器的效率将会降低甚至发散，这意味着我们很难在 HMC 过程中调整质量参数获得物理的 π 介子质量。因此，目前的许多组态的 π 介子质量都相对较重。同样的，我们会在多个不同 π 介子质量的组态上计算同一物理量，再通过手征微扰论将其外推到物理的 π 介子质量情形，有时我们也称之为外推到物理点（physical point），通过不同函数形式进行外推的结果差异就被用作系统误差的估计。随着模拟方法和计算技术的进步，目前已经有一些作用量可以直接在物理的 π 介子质量上进行计算^[110-111]，可以大大降低甚至忽略这一项误差。

1.6.2 统计误差

在 2.2.1 小节提到，MCMC 将会使组态之间产生关联，从而在组态上计算的物理量（关联函数）之间也会产生关联。麻烦的问题在于，从组态到物理量的计算并不是线性的，因此对于不同物理量对应的关联特征，例如积分自相关长度，并不一致，这导致不同物理量之间的关联难以直接估计。另外，从关联函数 $\langle C \rangle$ 到物理量 $f(\langle C \rangle)$ 之间的函数关系不总是线性的，那么最终物理量的误差将会很难估计。尽管可以使用误差传递公式，但误差传递公式需要函数在中心值点附近变化平缓，但这并不总是满足，另外这样估计得到的误差相对于中心值可能并非对称。以上的这些问题通常可以通过重抽样方法（resampling）处理，我们最常用的是刀切法（jackknife）和自助法（bootstrap）。实际上，刀切法是自助法的一个线性近似，因此在代码复杂度上有一些优势，也是最常用的选择，以下我们将

介绍刀切法的具体流程。

考虑总共有 N 个采样的样本 $\{X\} = \{X_1, \dots, X_N\}$, 有均值 \bar{X} , 有定义在均值上的非线性函数 $f(\bar{X})$ 。现在将第 i 个采样从样本中除去, 得到新的样本 $\{X\}^{(i)} = \{X_1, \dots, X_{i-1}, X_{i+1}, \dots, X_N\}$, 相应的有均值 $\bar{X}^{(i)}$ 和非线性函数 $f_i = f(\bar{X}^{(i)})$ 。这样, 可以得到一个长度为 N 的非线性函数集合 $\{f_1, \dots, f_N\}$, 有这些结果的均值 \bar{f} 。刀切法给出了基于上述量的对于非线性函数误差的估计

$$\frac{1}{N} \hat{\sigma}^2 [f(\bar{X})] = \frac{N-1}{N} \sum_{i=1}^N (f_i - \bar{f})^2. \quad (1-172)$$

现在将组态集合 $\{U_\mu\}$ 看作 $\{X\}$, 那么通过在去掉一个组态的子集上进行物理量的计算, 最后对 N 个结果进行代数运算就可以得到对物理量统计误差的估计。顺便一提, 自取法重抽样样本是从原样本中可重复地抽取 N 个采样得到的, 最终的误差估计公式与样本数量有关。

现在让我们结合 2.2.1 小节结尾引入的分批均值的方法, 这意味着可以通过在组态集合中去除连续的一段组态而非一个组态来进行上述的刀切法计算, 那么最终我们对统计误差的估计就已经处理了 MCMC 自相关和所有物理量之间的关联。

1.7 小结

本章从路径积分量子化入手, 简单介绍了格点 QCD 的基本框架, 并介绍了我们后续研究中采用的格点作用量, 特别对它们的各向异性形式进行了进一步的讨论。之后通过说明格点 QCD 中的物理可观测量引入组态平均的概念, 那么我们可以通过统计的手段估计一个物理可观测量的统计误差。这些可观测量的计算通常都基于夸克传播子构造, 而夸克传播子在格点 QCD 中对应于费米子矩阵的逆, 至此一个物理问题最终转化为了通过线性代数求解矩阵逆的过程。在此过程中, 针对我们关心的物理问题, 还可以引入涂摩技术提高相关态的信噪比。蒸馏方法作为一种特殊的涂摩方案, 在构造强子算符上有天然的优势, 我们最终采用了相关流程得到了非常好的信噪比。

具体求解矩阵逆是通过求解线性方程组进行的, 我们简单介绍了 Krylov 子空间算法和其中一些流行的迭代求解算法, 并估计了求解器的收敛速度, 大致与矩阵的条件数相关。以此为基础, 我们引入了奇偶预处理用以降低条件数, 这种方法已经在各大格点计算软件中得到了广泛应用。最后, 我们简单介绍了格点上系统误差的几个主要来源, 并引入刀切法对最终物理结果的误差进行估计。

第 2 章 $N_f = 2$ 格点 QCD 规范系综标定

2.1 格点配置

表 2-1 规范系综参数

Table 2-1 Parameters of the gauge ensemble.

$L_s \times L_t$	β	a_t^{-1} (GeV)	ξ	m_π (MeV)	N_{cfg}
$16^3 \times 128$	2.0	6.894(51)	~ 5.3	348.5(1.0)	6991

我们在 $L_s^3 \times L_t = 16^3 \times 128$ 的各向异性格点上生成了有 $N_f = 2$ 简并的 u, d 夸克的规范组态。我们选用了各向异性的蝌蚪图改进的 Symanzik 规范作用量^[67, 69]和各向异性的蝌蚪图改进的四叶草费米子作用量^[112-113]。作用量中的各项参数被调整为给出各向异性 $\xi = a_s/a_t \approx 5.3$ ，这里 a_t 和 a_s 分别是时间方向和空间方向的格距。费米子作用量中的夸克质量参数给出 π 介子质量 $m_\pi \approx 350$ MeV，有 $m_\pi a_s L_s \approx 3.9$ ，这保证了较小的有限体积效应。这个规范系综总共有 6991 个组态，如此大的统计量对于胶球以及夸克湮灭图相关的研究至关重要。规范系综的参数在表 2-1 中给出，更详细的检查和标定过程详见本章后续内容。

2.2 杂化 Monte Carlo

Markov 链 Monte Carlo (Markov chain Monte Carlo, MCMC) 是产生格点上规范组态的过程，具体使用杂化 Monte Carlo (hybrid Monte Carlo, HMC) 算法实现。组态生成是格点计算中最为消耗时间和算力的步骤，动辄以年为单位。由于难度很高，国际上普遍以合作组的形式支持生成一套合作组内共用的组态。目前，由国内合作组产生的包含四叶草费米子作用量的组态已经初步形成规模。在本节我们将看到 HMC 算法的主要构造思路，从中可以看到组态自相关的起源和估计方案。

2.2.1 Markov 链 Monte Carlo

回忆格点上的路径积分形式 (1-98)，我们需要一个按照概率密度分布

$$\frac{1}{Z} e^{-S_g(U_\mu)} \det [\mathcal{M}(U_\mu)] \quad (2-1)$$

产生的规范链接组态 U_μ 。这一形式与统计力学中的 Boltzmann 分布非常类似，即系统中某种状态的能量为 S ，那么这种状态发生的概率正比于 e^{-S} 。对于某个规范链接组态，认为其能量是 $S_g(U_\mu) - \ln \{\det [\mathcal{M}(U_\mu)]\}$ ，我们就得到了一个符合 Boltzmann 分布的形式。但是，由于费米子矩阵的行列式实际上非常难计算，在格点 QCD 发展的早期，人们会忽略这一项的贡献，将其取为 1，这也就是淬火近似 (quenched approximation) 的具体实现方式。

在统计学中, MCMC 是一种能够从某种概率分布中采样的算法, 通常用于数值积分的估计。Markov 链是一个系统在不同状态之间跃迁的随机过程, 变换的结果仅与上一个状态相关而不能追溯更早的历史。MCMC 通过构造一个不同状态有着相应发生概率的 Markov 链, 在它平衡后截取一段样本, 它们符合设定的概率密度分布。采样的规模越大, 样本就越符合真正的概率分布。当采用淬火近似时, 通常采用赝热浴 (heat bath) 算法^[20, 114] 或者过弛豫 (over-relaxation) 算法^[115-118] 产生 Markov 链, 它们通过某种方式直接对规范链接进行更新。更一般的, 有数种算法可以构造 MCMC, 我们介绍一种通用的 Metropolis-Hastings 算法^[119-120]。这种算法首先定义了细致平衡条件, 令两种状态之间互相跃迁的发生概率相等,

$$P(x'|x)P(x) = P(x|x')P(x), \implies \frac{P(x'|x)}{P(x|x')} = \frac{P(x')}{P(x)}. \quad (2-2)$$

将跃迁概率 $P(x'|x)$ 写成提议分布和接受概率的乘积 $g(x'|x)A(x', x)$, 这是为了分离状态的产生和接受两个步骤, 适当的提议分布可以简化生成新的状态 x 的过程。

$$\frac{A(x', x)}{A(x, x')} = \frac{g(x|x')}{g(x'|x)} \frac{P(x')}{P(x)}. \quad (2-3)$$

有一个简单的接受概率选取

$$A(x', x) = \min \left[1, \frac{g(x|x')}{g(x'|x)} \frac{P(x')}{P(x)} \right]. \quad (2-4)$$

考虑最简单的提议分布 $g(x'|x) = g(x|x')$, 即采用对称的新状态 x' 产生方案, 算法退化到 Metropolis 算法^[119], 那么有格点 QCD 的 MCMC 接受概率

$$A(U'_\mu, U_\mu) = \min \left\{ 1, e^{-[S_g(U'_\mu) - S_g(U_\mu)]} \frac{\det [\mathcal{M}(U'_\mu)]}{\det [\mathcal{M}(U_\mu)]} \right\}. \quad (2-5)$$

理论上, 我们可以任意选取 $g(U'_\mu|U_\mu)$, 但是不加限制的随意选取会导致极低的接受概率, 如何通过 U_μ 产生合适的 U'_μ 是需要考虑的问题。

MCMC 有自相关 (autocorrelation) 的特点。由于每个状态都依赖上一个状态生成, 使得这两个状态之间必定存在某种关联, 反映到最终的 MCMC 中, 某个状态可能与向前数个状态也存在关联。理想情况下一个样本中的各个采样应当是相互独立的, 因此需要引入自相关长度的概念来描述某个来自 MCMC 的样本中实际上相互独立的采样数。回忆式 (1-98), 我们使用样本平均来估计积分,

$$\int \mathcal{D}U_\mu P(U_\mu) g(U_\mu) \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g[U_\mu^{(i)}]. \quad (2-6)$$

令第 i 个组态对应的 $g[U_\mu^{(i)}] = g_i$, 这些 g_i 的平均值为 \bar{g} 。若所有采样相互独立, 根据中心极限定理,

$$\bar{g} \sim \mathcal{N} \left[E(g), \frac{1}{N} \text{var}(g) \right]. \quad (2-7)$$

$\text{var}(g)$ 是随机变量的方差，一般采用无偏估计

$$\text{var}(g) \approx \hat{\sigma}^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (g_i - \bar{g})^2. \quad (2-8)$$

那么有误差估计 $\frac{\hat{\sigma}^2}{N}$ 。但是，当采样不独立时，这个误差估计是偏小的，引入自相关长度 τ_{int} ，也称为积分自相关长度，实际有

$$\bar{g} \sim \mathcal{N}\left[E(g), \frac{\tau_{\text{int}}}{N} \text{var}(g)\right], \quad (2-9)$$

直观理解就是平均每 τ_{int} 采样有一个真正独立的采样。考虑一个有关联的样本 $\{X_i, i \in [1 \dots N]\}$ ，它的均值方差应该是

$$\text{var}(\bar{X}) = \frac{1}{N^2} \sum_{i,j=1}^N \text{cov}(X_i, X_j). \quad (2-10)$$

假设 Markov 链上不同的位置的关联仅与距离相关，即 $\text{cov}(X_i, X_j) = f(|i - j|)$ ，那么显然有 $\text{var}(X_i) = f(0)$ ，

$$\begin{aligned} \text{var}(\bar{X}) &= \frac{1}{N^2} \sum_{i,j=1}^N f(|i - j|) = \frac{1}{N^2} \sum_{t=-(N-1)}^{N-1} (N - |t|) f(|t|) \\ &= \frac{1}{N} f(0) + \frac{2}{N} \sum_{t=1}^{N-1} \left(1 - \frac{t}{N}\right) f(t). \end{aligned} \quad (2-11)$$

对于相互独立的采样，当 $i > 0$ 时有 $f(i) = 0$ ，

$$\text{var}(\bar{X}, \bar{X})_{\text{indep}} = \frac{1}{N} f(0), \implies \tau_{\text{int}} = \frac{\text{var}(\bar{X}, \bar{X})}{\text{var}(\bar{X}, \bar{X})_{\text{indep}}} = 1 + 2 \sum_{t=1}^{N-1} \left(1 - \frac{t}{N}\right) \frac{f(t)}{f(0)}. \quad (2-12)$$

那么我们可以定义对积分自相关长度的估计

$$\begin{aligned} \hat{\tau}_{\text{int}} &= 1 + 2 \sum_{t=1}^{N-1} \left(1 - \frac{t}{N}\right) \frac{1}{f(0)} \frac{1}{N-t} \sum_{i=1}^{N-t} (g_i - \bar{g})(g_{i+t} - \bar{g}) \\ &= 1 + 2 \sum_{t=1}^{N-1} \frac{1}{f(0)} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N-t} (g_i - \bar{g})(g_{i+t} - \bar{g}) \\ &= 1 + 2 \sum_{t=1}^{N-1} \frac{\sum_{i=1}^{N-t} (g_i - \bar{g})(g_{i+t} - \bar{g})}{\sum_{i=1}^N (g_i - \bar{g})(g_i - \bar{g})}. \end{aligned} \quad (2-13)$$

最终对于误差的估计就是 $\frac{1}{N} \hat{\tau}_{\text{int}} \hat{\sigma}^2$ 。需要指出的是， $\hat{\tau}_{\text{int}}$ 的误差将会随着 N 发散，因此通常令对 t 的求和有上限 t_0 ，画出 $\tau_{\text{int}}(t_0)$ 的图，寻找平台来确定合适的 t_0 。

另外有种称为分批均值 (batch means) 的方法来估计 MCMC 上的误差。这种方法将 MCMC 上的一段长度为 N 的采样分成均匀的 M 份，对每份中的 N/M 个采样直接取平均值，从而得到了一段长度为 M 的新的采样，直接使用 $\frac{1}{M} \hat{\sigma}^2$ 进行误差估计即可。分批均值考虑若 $M \gg \tau_{\text{int}}$ ，那么这新的 M 个采样之间显然几乎没有关联，从而可以使用正常的误差估计来进行后续处理。

2.2.2 分子动力学

除了使用 MCMC 获得依概率密度分布的样本外，分子动力学（molecular dynamics, MD）作为一种模拟分子/原子体系运动的多体模拟方法，天然的可以产生符合 Boltzmann 分布的样本，因此被应用到了格点 QCD 研究中^[121]。一个有 N 个自由度的体系有 Hamiltonian

$$\mathcal{H}[p, q] = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + S(q). \quad (2-14)$$

q 是广义坐标，有与其共轭的广义动量 p ， $S(q)$ 是仅与广义坐标相关的势能函数。体系随着虚拟的“时间” τ 演化，即 Hamilton 正则方程，

$$\begin{cases} \frac{dp_i}{d\tau} = -\frac{\partial \mathcal{H}[p, q]}{\partial q_i} = -\frac{\partial S(q)}{\partial q_i}, \\ \frac{dq_i}{d\tau} = \frac{\partial \mathcal{H}[p, q]}{\partial p_i} = p_i. \end{cases} \quad (2-15)$$

上述微分方程定义了一条 p, q 沿着 τ 演化的路径，路径上的 Hamiltonian 保持不变。理论上，若我们可以对 Hamilton 正则方程进行准确的积分，最终的系统将趋于平衡态，产生 Boltzmann 分布 $P(p, q) \propto e^{-\mathcal{H}} = e^{-\sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} - S(q)}$ 。这里广义坐标和广义动量是独立的，因此广义坐标的概率密度正是 $P(q) = e^{-S(q)}$ 。至于广义动量的分布，它是一个标准 Gaussian 分布的形式，可以通过随机数生成器配合少量代数运算得到。现在来考虑规范组态 U_μ ，将这些场作为广义坐标，那么需要生成相应的动量场 π_μ 。对一段时间 τ_0 积分后，为了获得更好的参数相空间样本，需要重新从 Gaussian 分布生成 π_μ （这里模拟一个“碰撞”的过程，使得动量完全失去“记忆”），再次对 τ_0 积分，重复上述步骤，这就是一般 MD 对广义坐标的模拟过程。这里的重采样时间 τ_0 称为时间步长（timestep）或积分步长，显然当对 τ_0 的积分结束时我们就得到了 Markov 链上一个新的状态。

但是实践上，我们没有办法将微分方程解析积分，只能对一段时间 τ_0 数值积分。我们知道，一个 Hamilton 体系是定义在光滑流形上的辛结构（symplectic structure），而一般的数值积分方式很可能会破坏辛结构，而那些保持辛结构的则称为辛积分（symplectic integrator），一个 k 阶的辛积分可以保证系统偏离辛结构是 $\mathcal{O}(\tau_0^{k+1})$ 阶的。I. P. Omelyan, I. M. Mryglod 和 R. Folk 系统地讨论了辛积分的构造方法和分类^[122]，并给出了所有 6 阶以下，部分最高 8 阶的辛积分详细步骤。以某个 2 阶辛积分为例^[123-124]，具体步骤见算法 4，可以看到广义动量 p 每次只更新半步。从这种 2 阶辛积分可以很容易衍生出另一种积分方案，通过将积分步长 τ_0 分为更小的 $\delta\tau$ ，对每个 $\delta\tau$ 应用 2 阶辛积分，合并两个连续的 p 更新步骤，最后得到我们称为蛙跳（leapfrog）积分的算法 5。

蛙跳积分仍然会带来对辛结构 $\mathcal{O}(\tau_0\delta\tau_0^2)$ 的偏离，意味着最终得到的概率分布 $e^{-S(U_\mu)}$ 也会有一个相应阶数的偏移。文章^[122]实际上还提出了一些需要计算广义坐标二阶偏导数的辛积分，这被格点 QCD 研究人员称为力梯度积分器；

算法 4 A 2nd order symplectic integrator

```

1: procedure OMF2( $p, q, H, \tau_0$ )                                ▷ Update  $p$  and  $q$  with Hamiltonian  $H$  in time  $\tau_0$ 
2:    $p \leftarrow p - \frac{\partial H}{\partial q} \frac{\tau_0}{2}$                                 ▷ Update  $p$  in time  $\frac{\tau_0}{2}$ 
3:    $q \leftarrow q + \frac{\partial H}{\partial p} \tau_0$                                 ▷ Update  $q$  in time  $\tau_0$ 
4:    $p \leftarrow p - \frac{\partial H}{\partial q} \frac{\tau_0}{2}$                                 ▷ Update  $p$  in time  $\frac{\tau_0}{2}$ 
5: end procedure

```

算法 5 Leapfrog integrator

```

1: procedure LEAPFROG( $p, q, H, \tau_0, \delta\tau$ )                      ▷ Update  $p$  and  $q$  with Hamiltonian  $H$  in time  $\tau_0$ 
2:    $p \leftarrow p - \frac{\partial H}{\partial q} \frac{\delta\tau}{2}$ 
3:   for  $i = 1 \rightarrow \tau_0/\delta\tau - 1$  do
4:      $q \leftarrow q + \frac{\partial H}{\partial p} \delta\tau$ 
5:      $p \leftarrow p - \frac{\partial H}{\partial q} \delta\tau$ 
6:   end for
7:    $q \leftarrow q + \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\delta\tau}{2}$ 
8: end procedure

```

另外，还可以通过一种基于 Poisson 括号的方法重新调整辛积分系数，以提高积分效率。M. A. Clark 和 A. D. Kennedy 等人在一种四阶辛积分的基础上对这两种改进方案进行了长期而深入的研究^[125-129]，指出这两种积分器都可以加速积分过程，并认为力梯度积分器将会在大尺度的格点 QCD 模拟中取得显著优势。后来，H. Lin 和 R. D. Mawhinney 指出这个二阶导数可以使用 Taylor 展开的技巧在数值上计算，而无需从作用量形式出发精确求解^[130]，简化了积分器的实现。

2.2.3 杂化 Monte Carlo 算法

1987 年，S. Duane, A. D. Kennedy, B. J. Pendleton 和 D. Roweth 将 MCMC 和 MD 结合了起来^[23]。他们考虑在 MD 过程中对离散时间 τ_0 的数值积分会使作用量产生偏移，因此提议在最终积分结束时，求解体系前后的 Hamiltonian 差值 $\Delta\mathcal{H}$ 来决定是否接受这一新的状态。他们称之为杂化 Monte Carlo (hybrid Monte Carlo, HMC) 算法，并证明了 HMC 算法对于任意的积分步长 τ_0 都会使 MCMC 收敛到期望的 Boltzmann 分布 $e^{-S(U_\mu)}$ 。当然积分步长仍然不能随意选取，因为过大的积分步长会产生过大的 $\Delta\mathcal{H}$ 导致接受概率非常低，使得 MCMC 中实际有效的规范组态很少；而过小的积分步长将导致非常严重的组态间关联。

对于含有费米子场的模拟，回忆我们需要的概率密度式 (2-1)，其中有费米子行列式矩阵 $\det \mathcal{M}(U_\mu)$ 难以计算。考虑一个可逆的矩阵 A ，有本征值 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N$ ，当它们的实部为正时有 Gaussian 积分 $\int \mathcal{D}\phi^* \mathcal{D}\phi e^{-\phi^\dagger A \phi}$ 。回忆 1-30，对 Gaussian 积分引入外源场

$$\mathcal{Y}[\chi^*, \chi] = \int \mathcal{D}\phi^* \mathcal{D}\phi e^{-\phi^\dagger A \phi + \chi^\dagger \phi + \phi^\dagger \chi} = \int \mathcal{D}\phi^* \mathcal{D}\phi e^{-(\phi - A^{-1} \chi)^\dagger (A \phi - \chi) + \chi^\dagger A^{-1} \chi}. \quad (2-16)$$

ϕ^*, ϕ 是复数构成的列向量, χ^*, χ 是相应外源场。换元 $\phi \rightarrow A^{-1}(\phi + \chi)$, $\phi^* \rightarrow \phi^* + A^{-1T} \chi^*$, 积分测度相应变为 $|\det A^{-1}| \mathcal{D}\phi^* \mathcal{D}\phi$,

$$\mathcal{Y}[\chi^*, \chi] = |\det A^{-1}| e^{\chi^\dagger A^{-1} \chi} \int \mathcal{D}\phi^* \mathcal{D}\phi e^{-\phi^\dagger \phi} = \frac{e^{\chi^\dagger A^{-1} \chi}}{|\det A|} \prod_i \int d\phi_i^* d\phi_i e^{-\phi_i^* \phi_i}. \quad (2-17)$$

应用换元 $\phi \rightarrow a + ib$, $\phi^* \rightarrow a - ib$ 以及实数的标准高斯积分公式 $\int dx e^{-ax^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{a}}$,

$$\int \mathcal{D}\phi^* \mathcal{D}\phi e^{-\phi^\dagger A \phi} = \mathcal{Y}[0, 0] = \frac{(2\pi)^N}{|\det A|}, \quad (2-18)$$

$$\Rightarrow |\det A| = \frac{1}{(2\pi)^N} \int \mathcal{D}\phi^* \mathcal{D}\phi e^{-\phi^\dagger A^{-1} \phi}. \quad (2-19)$$

回到费米子行列式, 它对于味道是对角的, 那么行列式就是每个味道对应的费米子矩阵行列式的乘积, 例如对于一个包含 u, d 两种质量简并夸克的理论, 它们对应的费米子矩阵是完全相同的,

$$\det \mathcal{M}^{\text{total}}(U_\mu) = \prod_{A=u,d} \det \mathcal{M}^A(U_\mu) = [\det \mathcal{M}(U_\mu)]^2. \quad (2-20)$$

回忆 γ_5 -Hermiticity 式 (1-28),

$$[\det \mathcal{M}(U_\mu)]^2 = (\det \gamma_5)^2 [\det \mathcal{M}(U_\mu)]^2 = \det [\mathcal{M} \mathcal{M}^\dagger(U_\mu)]. \quad (2-21)$$

$\mathcal{M} \mathcal{M}^\dagger$ 是正定的 Hermitian 矩阵, 可以应用刚刚得到的积分形式。额外引入复数标量场 ϕ^*, ϕ , 那么最终概率密度式 (2-1) 可以写成

$$\frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-S_g(U_\mu)} [\det \mathcal{M}(U_\mu)]^2 = \frac{1}{\mathcal{Z}'} \int \mathcal{D}\phi^* \mathcal{D}\phi e^{-S_g - \phi^\dagger (\mathcal{M} \mathcal{M}^\dagger)^{-1} \phi}, \quad (2-22)$$

$$\mathcal{Z}' = \int \mathcal{D}U_\mu \mathcal{D}\phi^* \mathcal{D}\phi e^{-S_g - \phi^\dagger (\mathcal{M} \mathcal{M}^\dagger)^{-1} \phi}. \quad (2-23)$$

也称引入的标量场为赝费米子场。参照式 (1-98) 对规范链接积分的处理方法, 通过采样符合分布的赝费米子场 $\{\phi^*, \phi \sim e^{-\phi^\dagger (\mathcal{M} \mathcal{M}^\dagger)^{-1} \phi}\}$, 将积分转换为求平均

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O} \rangle_T &= \int \mathcal{D}U_\mu \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-S_g(U_\mu)} \det [\mathcal{M}(U_\mu)] \langle \mathcal{O} \rangle_{T, \text{fermion}} \\ &\approx \frac{1}{N N'} \sum_{\{U_\mu, \phi^*, \phi\}} \langle \mathcal{O} \rangle_{T, \text{fermion}} \\ &\quad \text{with } N \left\{ U_\mu \sim \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-S_g(U_\mu) - \phi^\dagger (\mathcal{M} \mathcal{M}^\dagger)^{-1} [U_\mu] \phi} \right\} \\ &\quad \text{and } N' \left\{ \phi^*, \phi \sim e^{-\phi^\dagger (\mathcal{M} \mathcal{M}^\dagger)^{-1} [U_\mu] \phi} \right\} \end{aligned} \quad (2-24)$$

取 $\phi = \mathcal{M} \zeta$, 当按照标准高斯分布 $e^{-\zeta^\dagger \zeta}$ 随机产生 ζ 时, ϕ 天然地按照 $e^{-\phi^\dagger (\mathcal{M} \mathcal{M}^\dagger)^{-1} \phi}$ 分布。理论上应当取尽量多的 ϕ 才能得到足够好的近似, 但实践上仅取单个 ϕ 已经可以将行列式近似得不错, 即 $N' = 1$, 这归功于费米子矩阵庞大的规模。

现在考虑奇偶预处理。采用奇奇不对称的形式 (1-164)，不难得到

$$[\det \mathcal{M}(U_\mu)]^2 = [\det(A_{ee}) \det(A_{oo} - \kappa^2 D_{oe} A_{ee}^{-1} D_{eo})]^2. \quad (2-25)$$

令 $Q = A_{oo} - \kappa^2 D_{oe} A_{ee}^{-1} D_{eo}$ ，那么需求的概率分布变为

$$e^{-S_g(U_\mu) - \phi^\dagger (QQ^\dagger)^{-1} \phi + 2 \ln \det(A_{ee})} = e^{-S_g(U_\mu) - \phi^\dagger (QQ^\dagger)^{-1} \phi + 2 \text{Tr} \ln(A_{ee})}. \quad (2-26)$$

费米子场 ϕ 是原来的一半大小，并且如前所述 QQ^\dagger 应当有更小的条件数，方便求逆。

这样，分子动力学中的体系 Hamiltonian 可以写成

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{x,\mu} \text{Tr} [\pi_\mu(x) \pi_\mu(x)] + S_g(U_\mu) + \phi^\dagger (QQ^\dagger)^{-1} [U_\mu] \phi - 2 \text{Tr} \ln(A_{ee}). \quad (2-27)$$

π_μ 是与广义坐标 U_μ 对应的广义动量，取迹作用于颜色指标。写出 Hamilton 正则方程^[23, 121, 131-132]，所有导数定义于 $\text{SU}(3)$ 所在的流形上，

$$\begin{cases} \frac{d}{d\tau} \pi_\mu(x) = - \frac{\partial S_g(U_\mu)}{\partial U_\mu(x)} - \phi^\dagger \frac{\partial (\mathcal{M} \mathcal{M}^\dagger)^{-1} [U_\mu]}{\partial U_\mu(x)} \phi + 2 \frac{\partial \text{Tr} \ln(A_{ee})}{\partial U_\mu(x)}, \\ \frac{d}{d\tau} U_\mu(x) = i \pi_\mu(x) U_\mu(x). \end{cases} \quad (2-28)$$

第一行式中还有数个偏导数，它们的作用类似于力，是动量的时间导数。假设对规范链接 $U_\mu(x)$ 进行一个小的变分，规范作用量的变化是

$$\delta S_g(U_\mu) = \sum_{x,\mu} \text{Tr} [\delta U_\mu(x) F_\mu(x) + F_\mu^\dagger(x) \delta U_\mu^\dagger(x)]. \quad (2-29)$$

这里的 $F_\mu(x)$ 称为规范力。对于小方格作用量，规范力就是将所有从 x 出发到 $x + \mu$ 的三格长的路径上规范链接乘积求和（实际上就是将所有的订书钉求和）。规范力的推导相对简单，将所有涉及到 $U_\mu(x)$ 的 Wilson 圈去掉本身后求和即可。当把费米子作用量也纳入变分，可以得到类似的形式，相应的 $F_\mu(x)$ 被称为费米力。同时将 $\pi_\mu(x)$ 进行变分，考虑 Hamiltonian 的变化应当是 0，

$$0 = \delta \mathcal{H} = \sum_{x,\mu} \text{Tr} [\pi_\mu \delta \pi_\mu(x)] + \sum_{x,\mu} \text{Tr} [\delta U_\mu(x) F_\mu(x) + h.c.]. \quad (2-30)$$

有 $\delta U_\mu(x) = i \pi_\mu(x) U_\mu(x) \delta \tau$ ，考虑 $\pi_\mu(x) \in \mathfrak{su}(3)$ 有无迹反 Hermitian 性质，

$$\delta \pi_\mu(x) = - [i U_\mu(x) F_\mu - h.c.] \delta \tau + c I. \quad (2-31)$$

c 为任意复数， I 为单位矩阵。可以调整 c 使 $\delta \pi_\mu(x)$ 无迹反 Hermitian，从而保持 $\pi_\mu(x)$ 的相应性质。那么可以将 Hamilton 正则方程写成更新 $\delta \tau$ 的形式

$$\begin{cases} U'_\mu(x) = e^{i \pi_\mu(x) \delta \tau} U_\mu(x), \\ i \pi'_\mu(x) = i \pi_\mu(x) + [U_\mu(x) F_\mu(x)]_{\text{TA}} \delta \tau. \end{cases} \quad (2-32)$$

算法 6 Hybrid Monte Carlo

```

1: procedure HMC( $U_\mu, \tau_0, \delta\tau$ ) ▷ HMC for 1 trajectory
2:   Save  $U_\mu$ 
3:   Take  $\zeta$  from distribution  $e^{-\zeta^\dagger \zeta}$ , and  $\phi \leftarrow Q\zeta$ 
4:   Take  $\pi_\mu$  from distribution  $e^{-\frac{1}{2} \sum_{x,\mu} \text{Tr}[\pi_\mu(x)\pi_\mu(x)]}$ 
5:    $\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{x,\mu} \text{Tr}[\pi_\mu(x)\pi_\mu(x)] + S_g(U_\mu) + \phi^\dagger (QQ^\dagger)^{-1} [U_\mu] \phi - 2\text{Tr} \ln(A_{ee})$ 
6:    $i\pi_\mu(x) = i\pi_\mu(x) + [U_\mu(x)F_\mu(x)]_{\text{TA}} \frac{\delta\tau}{2}$  ▷ Start leapfrog
7:   for  $i = 1 \rightarrow \tau_0/\delta\tau - 1$  do
8:      $U_\mu(x) = e^{i\pi_\mu(x)\delta\tau} U_\mu(x)$ 
9:      $i\pi_\mu(x) = i\pi_\mu(x) + [U_\mu(x)F_\mu(x)]_{\text{TA}} \delta\tau$ 
10:  end for
11:   $U_\mu(x) = e^{i\pi_\mu(x)\frac{\delta\tau}{2}} U_\mu(x)$  ▷ End leapfrog
12:   $\mathcal{H}' = \frac{1}{2} \sum_{x,\mu} \text{Tr}[\pi_\mu(x)\pi_\mu(x)] + S_g(U_\mu) + \phi^\dagger (QQ^\dagger)^{-1} [U_\mu] \phi - 2\text{Tr} \ln(A_{ee})$ 
13:   $\Delta\mathcal{H} = \mathcal{H}' - \mathcal{H}$ 
14:  if  $\Delta\mathcal{H} > 0$  then
15:    Take  $a$  from uniform distribution  $[0, 1]$ 
16:    if  $a > e^{-\Delta\mathcal{H}}$  then
17:      Reject update, revert saved  $U_\mu$ 
18:    end if
19:  end if
20: end procedure

```

颜色指标上的无迹反 Hermitian 算符定义为 $[A]_{\text{TA}} = A - A^\dagger - \frac{1}{N_c} \text{Tr}(A - A^\dagger)$ 。最后，我们还需要规范力和费米力 F_μ 的具体表达形式，推导过程比较复杂，详细的四叶草作用量费米力公式参见 Karl Jansen 和 Chuan Liu 的文章 [3] 或者 Xiang-Qian Luo 的文章 [133]。大体上，最后需要计算两个辅助场 $X = (QQ^\dagger)^{-1}\phi$, $Y = Q^\dagger X$ 以及它们的直乘，再乘上一些规范链接乘积，最后做线性组合并取迹。其中最为耗时的步骤当然就是求解 $QQ^\dagger X = \phi$ 这一线性方程组的步骤。为了加速 HMC，还有一些方法对费米子矩阵做不同的处理^[134-136]。2008 年，Robert G. Edwards, Bálint Joó 和 Huey-Wen Lin 在各向异性格点上完成了四叶草作用量的 HMC 过程^[113]。

HMC 的具体步骤见算法 6。一次这样的步骤称为一个轨迹 (trajectory)，一连串这样的轨迹构成了我们需要的 MCMC。在从 MCMC 中获取样本时，需要注意仅当分子动力学模拟到达平衡态时才可以使得规范组态符合 Boltzmann 分布，因此需要一段时间的预热 (warmup) 过程。由于 MCMC 的临近状态之间存在自相关，通常采取相隔数个轨迹取一个的做法降低自相关时间。值得一提的是，JLQCD 合作组的研究^[137]曾指出，使用对称形式的奇偶预处理将会使 HMC 性能提高约 30%^[135]。

以上 HMC 过程适用实际有个前提条件，即可以通过从标准高斯分布 $e^{-\zeta^\dagger \zeta}$ 抽取 ζ 获得按照 $e^{-\phi^\dagger (QQ^\dagger)^{-1}\phi}$ 分布的 $\phi = Q\zeta$ 。这是个很强的条件，仅对偶数味道的费米子矩阵天然成立。若是味道为奇数，例如 1 个味道的理论，费米子矩阵

特征值部分的 $|\det \mathcal{M}|^2$ 相应的会变成 $\det \mathcal{M}$ ，Hamiltonian 会变成

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{x,\mu} \text{Tr} [\pi_\mu(x) \pi_\mu(x)] + S_g(U_\mu) + \phi^\dagger Q^{-1} [U_\mu] \phi - \text{Tr} \ln(A_{ee}). \quad (2-33)$$

这时没有办法轻松得到符合相应分布的赝费米子场 ϕ 。

多项式杂化 Monte Carlo (polynomial hybrid Monte Carlo, PHMC) 通过类似于多玻色子技术^[138]的方法，采用非 Hermitian Chebyshev 多项式构造矩阵逆的近似^[139-142]，再将这种近似推广到奇数味道的费米子矩阵上^[143-144]，最后在两味轻夸克 (u, d) 和一味较重夸克 (s) 的设置下 (通常简称 $2+1$ 味，或者 $N_f = 2+1$) 的夸克场上完成了 PHMC 的流程^[137, 145]。使用多项式 $P_N(z)$ 近似 $\frac{1}{z}$ ，

$$P_N(z) = \sum_{i=0}^N (1-z)^i, \quad (2-34)$$

上式在 $|1-z| < 1$ 区间内随着 $N \rightarrow \infty$ 收敛于 $\frac{1}{z}$ 。若矩阵 A 的所有本征值都满足 $|1-\lambda_i| < 1$ ，那么可以直接将复数 z 替换成矩阵 A 。显然， $P_N(z) = 0$ 有 N 个根 $z_k = 1 - e^{i\frac{2\pi k}{N+1}}$ 。现在，将多项式写成单项式乘积的形式

$$P_N(z) = \sum_{i=0}^N (1-z)^i = (-1)^N \prod_{k=1}^N (z - z_k). \quad (2-35)$$

若 $N = 2n$ 是偶数，显然 $z_k = z_{2n+1-k}^*$ ，那么

$$P_N(z) = (-1)^N \prod_{k=1}^N (z - z_k) = \prod_{k=1}^n (z - z_k)(z - z_k^*). \quad (2-36)$$

对于费米子矩阵 $\det [Q - z_k^*] = \det [Q^\dagger - z_k^*] = \det [Q - z_k]^\dagger$ ，引入 $T_n(z) = \prod_{k=1}^n (z - z_k)$ ，那么费米子矩阵行列式可以写成

$$\begin{aligned} \det Q &= \frac{\det [QP_N(Q)]}{\det [P_N(Q)]} = \frac{\det [QP_N(Q)]}{\det [T_n(Q)T_n(Q)^\dagger]} \\ &= \det [QP_N(Q)] \int \mathcal{D}\phi^* \mathcal{D}\phi e^{-\phi^\dagger [T_n(Q)T_n^\dagger(Q)]^{-1} \phi}. \end{aligned} \quad (2-37)$$

现在可以重新按照高斯分布采样 ζ ， $\phi = T_n(Q)\zeta$ 就是符合分布的赝费米子场。除此之外，需要多计算一个行列式 $\det [QP_N(Q)]$ ，可以通过在 Metropolis 算法中额外添加一次接受判断来进行估计，称为噪声 Metropolis，具体可以参考文章^[137, 146]。

有理杂化 Monte Carlo (rational hybrid Monte Carlo, RHMC) 是另一种处理奇数味道的费米子矩阵的方法^[147-150]，其基本思路与 PHMC 类似，只是将用于近似矩阵逆的多项式替换成了有理函数。使用有理函数作近似的好处在于，在同样阶数下，它可以获得比多项式好得多的近似。有理近似中各项系数可以通过 Remez 算法^[151]具体得到，并可以应用多偏移求解器 (multi-shift solver)^[152]同时求解多个不同质量参数的费米子矩阵的逆。

表 2-2 $SO(3)$ 到 O 不可约表示 Λ 的分导表示Table 2-2 The restricted representation of $SO(3)$ to irreducible representation Λ of O .

J	Λ
0	A_1
1	T_1
2	$E \oplus T_2$
3	$A_2 \oplus T_1 \oplus T_2$
4	$A_1 \oplus E \oplus T_1 \oplus T_2$

表 2-3 O 不可约表示的基Table 2-3 Basis of irreducible representation of O , given in the form of basis of angular momentum representation.

Λ	d_Λ	Row 1	Row 2	Row 3
A_1	1	$ 0, 0\rangle$	—	—
A_2	1	$\frac{1}{\sqrt{2}}(3, 2\rangle - 3, -2\rangle)$	—	—
E	2	$ 2, 0\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(2, 2\rangle + 2, -2\rangle)$	—
T_1	3	$ 1, 1\rangle$	$ 1, 0\rangle$	$ 1, -1\rangle$
T_2	3	$ 2, 1\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(2, 2\rangle - 2, -2\rangle)$	$ 2, -1\rangle$

2.3 介子算符构造

1.4.2 小节我们通过内插场算符得到了一些量子数的夸克双线性型。但实际上表 1-1 给出的角动量量子数并不准确，当引入非局域算符（偏导数）时，需要一些额外的步骤来正确地构造格点上的介子算符。

2.3.1 格点上的介子算符

角动量量子数是空间旋转对称性群双覆盖 $SU(2)$ 的不可约表示。但是格点将时空分立，原本连续的旋转对称性被部分破坏了，实际上对称群变成了立方点群的双覆盖 O^D 。对于我们讨论的介子算符，角动量为整数，连续时空中的 $SU(2)$ 退化到 $SO(3)$ ，分立时空中的 O^D 退化到 O 。 O 阶数为 24，有不可约表示 A_1, A_2, E, T_1, T_2 ，维数分别为 1, 1, 2, 3, 3。从连续时空的角动量表示可以通过分导表示得到分立时空的子群不可约表示直和的形式^[153-154]，表 2-2 给出了角动量 ≤ 4 情形的分导表示。对于某个特定不可约表示，例如 T_1 ，它出现在角动量为 1, 3, 4 的分导表示中，这意味着一个 O 上的 T_1 表示算符将会在这三个及更高的角动量态上有投影。因此，表 1-1 中的角动量量子数 0, 1 应该分别写成 A_1, T_1 。自然地，可以将 O 群不可约表示的基写成角动量表示基的形式，对应关系见表 2-3。

在角动量表示下，两个不可约表示直乘可以分解成一些不可约表示的直和，表示中每行的具体构造方法由 Clebsch-Gordan 系数给出。 O 群中同样有 CG 系数，详见 S. Basak 等人的文章^[154]中的表 XVII。有了以上的约定，现在可以通过 CG 系数构造其他不可约表示的算符，再通过基变换构造各种对应角动量更高

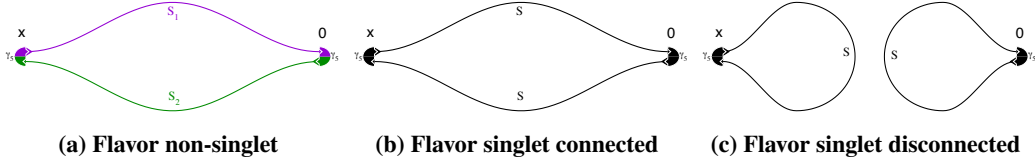


图 2-1 味道多重态和单态 Wick 收缩示意图，来自综述 [2]

Figure 2-1 Graphical representation of the contraction for a flavor nonsinglet and singlet meson.

的算符了。J. J. Dudek 等人以这样的方式，通过 Dirac 矩阵和导数构造了大量零动量下对应到角动量态的介子算符^[70]。例如对于赝标量介子，在引入至多 2 阶导数的情形下， Γ 内插总共有 5 种形式

$$\Gamma = \gamma_5, \gamma_4\gamma_5, \gamma_4\gamma_5\gamma_i\nabla_i, \gamma_i\mathbb{B}_i, \gamma_4\gamma_i\mathbb{B}_i. \quad (2-38)$$

需要特别指出，以上讨论均仅在构造静止的介子算符时有效。在构造带动量的介子算符时，由于动量方向会使得旋转对称性被进一步破坏，算符所对应的不可约表示将会进一步分导到对应的小群表示^[155]，此时需要使用小群上良好定义的螺旋度（helicity）算符才能够获得相应的介子态^[156]。

2.3.2 味道单态介子关联函数构造

我们的研究主要基于轻强子中的味道单态赝标量介子 $\eta(\eta')$ 进行。在 $N_f = 2$ 情形下，味道单态的轻强子同样也是同位旋标量（单态），这种算符有一般形式

$$\mathcal{O}_\Gamma = \frac{1}{\sqrt{2}} (\bar{u}\Gamma u + \bar{d}\Gamma d). \quad (2-39)$$

Γ 内插决定了算符的量子数。在 1.4.2 小节，我们推导了同位旋三重态赝标量介子 π 对应的关联函数计算形式。类似的，需要计算 $\mathcal{O}_\eta(y)\mathcal{O}_\eta(x)$ 的 Wick 收缩，

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_\eta(y)\mathcal{O}_\eta^\dagger(x) &= -\frac{1}{2} [\bar{u}(y)\gamma_5 u(y) + \bar{d}(y)\gamma_5 d(y)] [\bar{u}(x)\gamma_5 u(x) + \bar{d}(x)\gamma_5 d(x)] \\ &= -\frac{1}{2} \text{Tr} [-S^u(x, y)\gamma_5 S^u(y, x)\gamma_5 + S^u(y, y)\gamma_5 S^u(x, x)\gamma_5 \\ &\quad - S^d(x, y)\gamma_5 S^d(y, x)\gamma_5 + S^d(y, y)\gamma_5 S^d(x, x)\gamma_5 \\ &\quad + S^d(y, y)\gamma_5 S^u(x, x)\gamma_5 + S^u(y, y)\gamma_5 S^d(x, x)\gamma_5]. \end{aligned} \quad (2-40)$$

同样，根据 u, d 夸克简并有 $S^u = S^d = S^q$,

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_\eta(y)\mathcal{O}_\eta^\dagger(x) &= -\frac{1}{2} \text{Tr} [-2S^q(x, y)\gamma_5 S^q(y, x)\gamma_5 + 4S^q(y, y)\gamma_5 S^q(x, x)\gamma_5] \\ &= \text{Tr} [S^q(x, y)\gamma_5 S^q(y, x)\gamma_5 - 2S^q(y, y)\gamma_5 S^q(x, x)\gamma_5]. \end{aligned} \quad (2-41)$$

上式中有两种贡献项，分别对应于图 2-1 中的 (b)(c) 两图，被称为连通图和非连通图。显然的，非连通图需要在所有空间点上计算一个夸克圈，通过点源直接计算是不可能完成的，因此我们选用蒸馏方法^[87]来计算这种贡献。而味道三重态的式 (1-104) 对应的 (a) 图，在 u, d 夸克简并的情形下其实与连通图部分的贡献是完全相同的。

2.3.3 赝标量和矢量介子关联函数参数化

取 $\langle \Omega | \mathcal{O}_{\text{PS}}(0) | \text{PS}(\vec{p}) \rangle = Z_{\text{PS}}$, 回忆 π 介子两点关联函数参数化形式 (1-112) 及其推导过程, 赝标量介子正向传播的两点关联函数可以参数化为

$$\begin{aligned}
 C_{\text{PSPS}}^{(2)}(t, t_0) &= \sum_{\vec{y}} e^{i\vec{p} \cdot \vec{y}} \langle \mathcal{O}_{\text{PS}}(\vec{y}, t) \mathcal{O}_{\text{PS}}^\dagger(\vec{0}, t_0) \rangle \\
 &= \sum_{\vec{q}, \text{PS}, \vec{y}} e^{i\vec{p} \cdot \vec{y}} \langle \Omega | \mathcal{O}_{\text{PS}}(0, t) | \text{PS}(\vec{q}) \rangle \frac{e^{-i\vec{q} \cdot \vec{y}}}{2E_{\text{PS}}(\vec{q})V} \langle \text{PS}(\vec{q}) | \mathcal{O}_{\text{PS}}^\dagger(0, t_0) | \Omega \rangle \\
 &= \sum_{\vec{q}, \text{PS}} \frac{V\delta^3(\vec{p} - \vec{q})}{2E_{\text{PS}}(\vec{q})V} \langle \Omega | \mathcal{O}_{\text{PS}}(0) e^{-\hat{E}t} | \text{PS}(\vec{p}) \rangle \langle \text{PS}(\vec{p}) | e^{\hat{E}t_0} \mathcal{O}_{\text{PS}}^\dagger(0) | \Omega \rangle \\
 &= \sum_{\text{PS}} \frac{e^{-E_{\text{PS}}(\vec{p})(t-t_0)}}{2E_{\text{PS}}(\vec{p})} |Z_{\text{PS}}|^2.
 \end{aligned} \tag{2-42}$$

有 $\langle \Omega | \mathcal{O}_V^i(0) | V(\vec{p}, \lambda) \rangle = Z_V \epsilon_i(\vec{p}, \lambda)^{[70]}$, 其中 ϵ 是极化矢量而 λ 是极化方向, 那么矢量介子正向传播的两点关联函数可以参数化为

$$\begin{aligned}
 C_{\text{VV}}^{(2)ij}(t, t_0) &= \sum_{\vec{y}} e^{i\vec{p} \cdot \vec{y}} \langle \mathcal{O}_V^i(\vec{y}, t) \mathcal{O}_V^{j\dagger}(\vec{0}, t_0) \rangle \\
 &= \sum_{\vec{q}, V, \lambda} \frac{V\delta^3(\vec{p} - \vec{q}) e^{-E_V(\vec{q})(t-t_0)}}{2E_V(\vec{q})V} \langle \Omega | \mathcal{O}_V^i(0) | V(\vec{q}, \lambda) \rangle \langle V(\vec{q}, \lambda) | \mathcal{O}_V^{j\dagger}(0) | \Omega \rangle \\
 &= \sum_{V, \lambda} \frac{e^{-E_V(\vec{p})(t-t_0)}}{2E_V(\vec{p})} Z_V^2 \epsilon_i(\vec{p}, \lambda) \epsilon_j^*(\vec{p}, \lambda) \\
 &= \sum_V \frac{e^{-E_V(\vec{p})(t-t_0)}}{2E_V(\vec{p})} Z_V^2 \left(\delta_{i,j} + \frac{p_i p_j}{m_V^2} \right).
 \end{aligned} \tag{2-43}$$

特别的, 在矢量介子静止时, $\frac{p_i p_j}{m_V^2}$ 没有贡献, 那么参数化形式与赝标量介子一致。

2.3.4 广义本征值问题

现在我们可以通过一些手段得到数个相同量子数 J^{PC} 的介子算符, 例如式 (2-38) 中的赝标量介子内插场算符。它们不同程度地耦合到相同 J^{PC} 量子数的不同激发态, 即 $\langle \Omega | \mathcal{O}_{J^{PC}, \mu} | J^{PC, (i)}(\vec{p}, \lambda) \rangle = Z^{(i)} f_\mu(J^{PC}, \vec{p}, \lambda)^{[70]}$, (i) 指代不同的 J^{PC} 激发态。理论上可以将这些算符进行线性组合, 使组合后的算符与某个态有着极大的耦合的同时与其它态几乎没有耦合, 这样就能从关联函数中得到更清晰的信号。这种算符我们称为优化算符, 相应的线性组合系数通过求解一个广义本征值问题 (general eigenvalue problem, GEVP) 从相应的本征向量中得到, 有时也称这种过程为变分 (variation)。最初, 人们提出通过求解 GEVP 以从不同算符构成的关联函数中抽取不同态的能级^[157-159], 后来的基于此利用相应的本征向量构造优化算符是一种更健壮的做法^[2, 160]。

以赝标量介子为例，参考上一小节的关联函数参数化形式，取 $\vec{p} = \vec{0}$ ，不难得到相同量子数的不同算符 $\mathcal{O}_{\text{PS}}^k$ 之间的关联函数参数化形式为

$$\begin{aligned} C_{\text{PSPS}}^{(2)ij}(t, t_0) &= \sum_y \langle \mathcal{O}_{\text{PS}}^i(\vec{y}, t) \mathcal{O}_{\text{PS}}^{j\dagger}(\vec{0}, t_0) \rangle \\ &= \sum_{\text{PS}} \frac{e^{-m_{\text{PS}}(t-t_0)}}{2m_{\text{PS}}} Z_{\text{PS}}^i Z_{\text{PS}}^j. \end{aligned} \quad (2-44)$$

取 $t_0 = 0$ 和归一化的 $Z_{\text{PS}} \rightarrow \sqrt{2m_{\text{PS}}} Z_{\text{PS}}$,

$$C_{ij}(t) \equiv C_{\text{PSPS}}^{(2)ij}(t, 0) = \sum_{\text{PS}} e^{-m_{\text{PS}} t} Z_{\text{PS}}^i Z_{\text{PS}}^j. \quad (2-45)$$

对于 N 个赝标量介子算符， $C(t)$ 就是一个 $N \times N$ 的关联矩阵。当 t 和 t_0 都很大时，假设 C 由能量最低的 N 个态贡献^[159],

$$C_{ij}(t) = \sum_{n=1}^N e^{-m_{\text{PS}_n} t} Z_{\text{PS}_n}^i Z_{\text{PS}_n}^j. \quad (2-46)$$

有关于 Z_{PS} 的矩阵 $A_{ij} \equiv Z_{\text{PS}_i}^j$ ，总有矩阵 U 使得 $AU = \mathbb{1}_{N \times N}$ 。那么

$$[C(t)U]_{ij} = \sum_{k=1}^N \sum_{n=1}^N e^{-m_{\text{PS}_n} t} A_{ni} A_{nk} U_{kj} = e^{-m_{\text{PS}_j} t} A_{ji}, \quad (2-47)$$

$$[U^T C(t)U]_{ij} = \sum_{k,l=1}^N \sum_{n=1}^N e^{-m_{\text{PS}_n} t} U_{ki} A_{nk} A_{nl} U_{lj} = e^{-m_{\text{PS}_i} t} \delta_{ji}, \quad (2-48)$$

这意味着取 U 的第 n 列为 u_n ，那么算符 $\sum_{i=1}^N u_{ni} \mathcal{O}_{\text{PS}}^i$ 的两点关联函数将完全被参数化为 $e^{-m_{\text{PS}_n} t}$ 。

$$C(t)u_n = e^{-m_{\text{PS}_n} t} A_{ni} = e^{-m_{\text{PS}_n}(t-t_0)} e^{-m_{\text{PS}_n} t_0} A_{ni} = e^{-m_{\text{PS}_n}(t-t_0)} C(t_0)u_n. \quad (2-49)$$

根据上式，求解 u_n 和 m_{PS_n} 实际上成为了求解 GEVP，

$$C(t)v_n(t, t_0) = \lambda_n(t, t_0)C(t_0)v_n(t, t_0), \quad (2-50)$$

$\lambda_n \approx e^{-m_{\text{PS}_n}(t-t_0)}$ ， $v_n(t, t_0) \propto u_n$ ， $\mathcal{O}_{\text{PS}_n} = \sum_{i=1}^N v_{ni} \mathcal{O}_{\text{PS}}^i$ 就是能够最大程度耦合到第 n 个激发态的优化算符。这里的 v_n 依赖于 t 和 t_0 的取值，是因为实际上关联函数中有无穷多的激发态贡献，在 t 和 t_0 有限时会影响本征向量求解，得到的能量 m_{PS_n} 也有一定偏离。显然的，当算符数量 N 变大时，得到的本征值与本征向量偏离越少。 n 越大，优化算符 $\mathcal{O}_{\text{PS}_n}$ 效果越差，因为更高激发态的影响将会变大。

回忆表 1-1，考虑不同 Hermiticity 的算符会使得交叉关联函数有不同的时间方向周期性，进而使得求解 GEVP 时无法得到正确地消去激发态权重因子，因此在 (2-38) 式涉及的 5 个 Γ 内插中，我们取其中 3 个 Hermiticity 为正的 $\gamma_4 \gamma_5$ ， $\gamma_4 \gamma_5 \gamma_i \nabla_i$ 和 $\gamma_i \mathbb{B}_i$ 的算符进行变分操作。在 $\vec{n}_p = (0, 2, 2)$ 动量模式下优化前后的

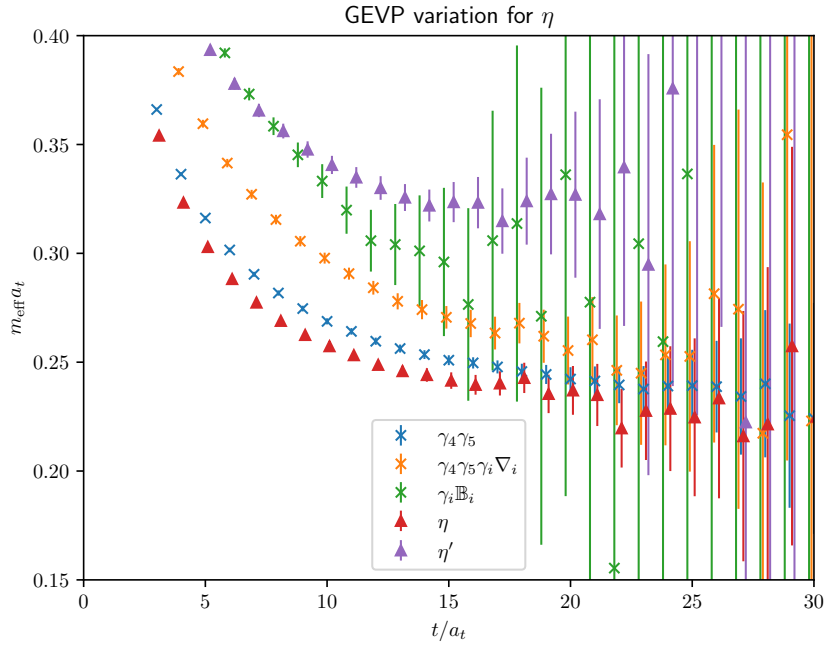


图 2-2 不同内插场算符求解 GEVP 得到的有效质量

Figure 2-2 Effective mass functions from different interpolating fields, along with the optimized operator obtained from solving GEVP. The triangle labels with two colors represent the results from optimized operators for base and the first exotic state, respectively.

结果如图2-2。图中可见，相比于代表普通内插场算符的蓝橙绿 \times 数据点，求解 GEVP 得到的优化算符确实更多地耦合到了 η 基态（代表基态优化算符结果的红色 \blacktriangle 更快地衰减到 η 质量的位置），尽管并不十分显著。值得一提的是紫色 \blacktriangle 数据对应的第一激发态 η' 有一定信噪比，但不足以让我们对 η 第一激发态的性质进行研究。

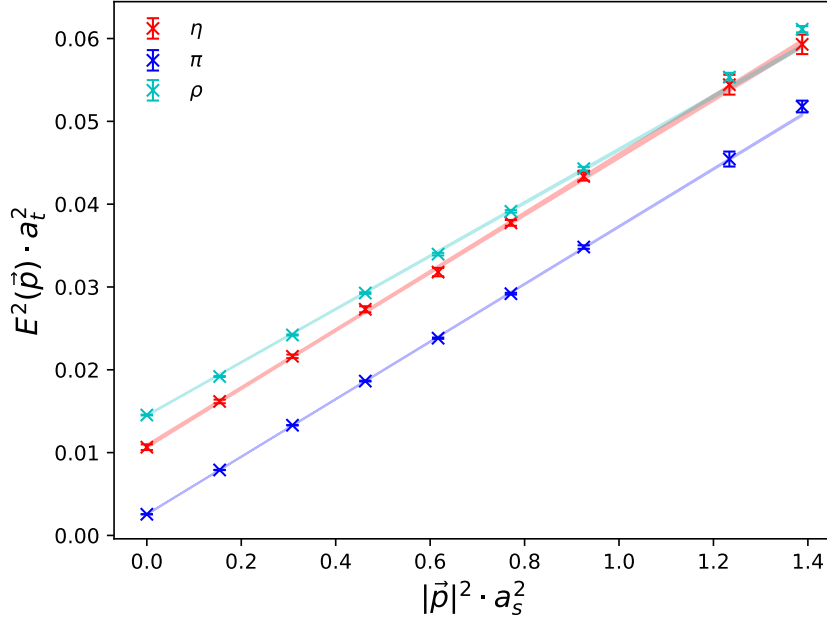

 图 2-3 π, η, ρ 的色散关系

Figure 2-3 The dispersion relations of π, η, ρ . The data points are lattice results and the shaded lines illustrate the fitted results using Eq. (2-51). The best fit values of ξ are 5.365(5), 5.34(3) for π, η , respectively. The cyan points are ground state energies obtained from the ρ correlators at different spatial momentum \vec{p} , and the cyan line is the fitted result with $\xi = 5.58(1)$ which deviates from 5.3 drastically due to the interference with nearby $\pi\pi$ states.

2.4 标定各向异性

各向异性的标定涉及规范各向异性和费米子各向异性。对于规范部分，可以从不同方向 Wilson 圈中抽取夸克静态势，再取它们的比值获得规范各向异性^[66]。而对于费米子部分，通常采用某种强子在不同动量下的色散关系测定，在这个规范系综上我们选用了 π 介子。

2.4.1 介子色散关系

需要对 π 以外的介子检验费米子各向异性的数值。我们计算了赝标量介子 π 和 η 的色散关系来检查各向异性 $\xi \approx 5.3$ ，用于抽取各个动量相应能量的两点关联函数均通过蒸馏方法计算得到，这里采用连续的色散关系形式

$$E_X^2(\vec{p})a_t^2 = m_X^2a_t^2 + \frac{1}{\xi}|\vec{p}|^2a_s^2, \quad (2-51)$$

这里 X 是某个特定的强子态， \vec{p} 是格点上的空间动量 $\vec{p} = \frac{2\pi}{La_s}\vec{n}_p$ ， \vec{n}_p 是空间动量的模式。图 2-3 展示了从不同动量的 π, η 和 ρ 介子两点关联函数中获得的能量，最高动量可以达到 $\vec{n}_p = (1, 2, 2)$ 。 π 和 η 的数据点落在一条可以用式 (2-51) 描述直线上，相应的 ξ 分别为 5.365(5) 和 5.34(3)（在图中以阴影线表示）。类似的，

表 2-4 不同组分夸克的赝标量介子和矢量介子的质量实验值

Table 2-4 Experimental values of the masses of pseudoscalar (P) and vector (V) mesons of quark configurations $n\bar{n}, n\bar{s}, n\bar{c}, s\bar{c}, n\bar{b}, s\bar{b}$ ^[1]. Here n refers to the light u, d quarks. The right most column lists the $m_V^2 - m_{PS}^2$. In the row of $s\bar{s}$ states, the mass of the $s\bar{s}$ pseudoscalar η_s is determined by the HPQCD collaboration from lattice QCD calculations^[161].

$q_l \bar{q}$	m_V (GeV)	m_{PS} (GeV)	$m_V^2 - m_{PS}^2$ (GeV ²)
$n\bar{n}$	0.775	0.140	0.581
$n\bar{s}$	0.896	0.494	0.559
$s\bar{s}$	1.020	0.686 ^[161]	0.570
$n\bar{c}$	2.010	1.870	0.543
$s\bar{c}$	2.112	1.968	0.588
$n\bar{b}$	5.325	5.279	0.481
$s\bar{b}$	5.415	5.367	0.523

使用式 (2-51) 矢量介子 ρ 作拟合, 给出相应的 $\xi = 5.58(1)$, 这与 5.3 有大幅偏离。这可以肯定地归因于在 ρ 能量附近且与 ρ 具有相同质心动量的 P 波 $\pi\pi$ 散射态。因此我们不使用 ρ 来检验 ξ 的数值。

2.5 标定格距

2.5.1 时间方向格距

在确定格点设置的格距时有些微妙的问题。一开始, 我们使用 Sommer 标度参数 $r_0 = 0.491 \text{ fm}$ ^[162] 并计算静态势来估计格距 a_s 。之后, 我们调整裸夸克质量参数以给出大约在 350 MeV 的 π 介子质量。但是我们发现, 矢量介子 ρ 的质量此时在 750 MeV, 这显著地低于预期 (考虑到在取物理的夸克质量 $m_\pi \sim 139 \text{ MeV}$ 时有 $m_\rho \sim 770 \text{ MeV}$)。这可能归因于 r_0 的不确定性, 因为不同格点合作组给定的值从 0.45 至 0.50 fm 不等^[17]。考虑到格点上强子质量的计算同时依赖于夸克质量参数和格距, 一种合理的流程可以先确定格距再调整夸克质量参数到我们期望的数值。这时需要选择一种对夸克质量不敏感的物理量。实验上, 由夸克组分 $q_l \bar{q}$ (q_l 表示 u, d, s 三种轻夸克, q 表示 u, s, d, c 四种夸克) 构成的赝标量介子质量 m_{PS} 和矢量介子质量 m_V 有关系,

$$\Delta m^2 = m_V^2 - m_{PS}^2 \approx 0.56 \sim 0.58 \text{ GeV}^2. \quad (2-52)$$

粒子物理综述 (Review of Partical Physics, RPP, PDG) 中这些赝标量和矢量介子的质量^[1] 在表 2-4 中收集, 同时还计算了它们的质量平方差。尽管还尚不知晓导致这一关系的具体原因, 但根据经验这些值对于夸克质量并不敏感。另一方面, η_s 的质量, 也就是 π 在 $s\bar{s}$ 组分下的对应介子 (计算中不考虑 $s\bar{s}$ 的湮灭图贡献), 被 HPQCD 合作组的格点 QCD 计算确定为 $m_{\eta_s} = 0.686(4) \text{ GeV}$ ^[161]。尽管 η_s 并不是一个实际的物理态, 相应的质量平方差 $m_\phi^2 - m_{\eta_s}^2 \approx 0.570 \text{ GeV}^2$ 也与经验公式

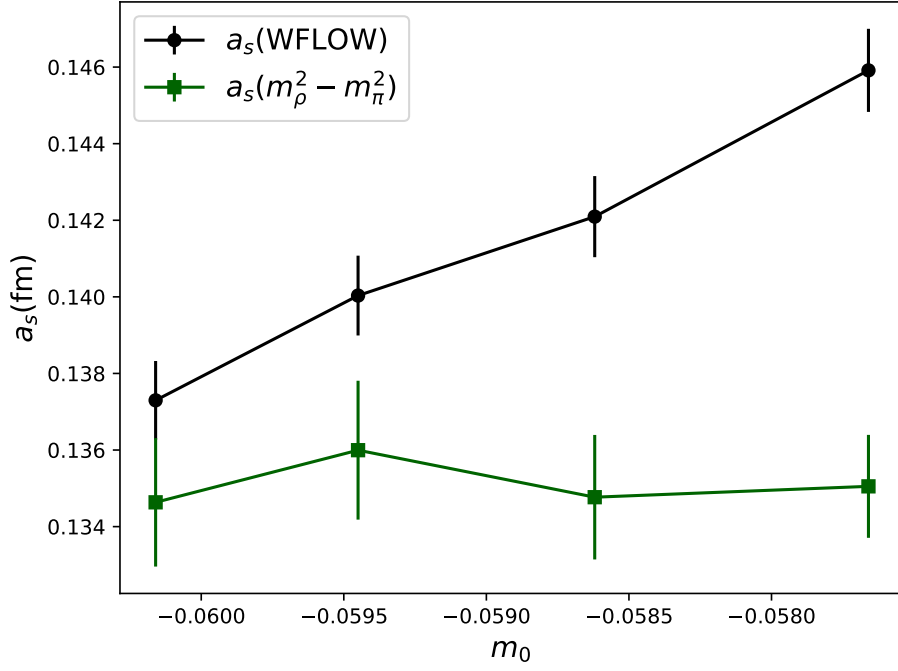


图 2-4 使用 Wilson 流和质量平方差方法得到的格距 a_s 随夸克质量参数 m_0 的变化

Figure 2-4 The lattice spacing a_s estimated by the Wilson flow method and the squared mass difference method as a function of quark mass parameter m_0 . The black line represent the results from the Wilson flow method and the other for the squared mass difference method. The corresponding π mass varies from 260~415 MeV.

(2-52) 给出的区间吻合。这样，我们可以假定经验公式 (2-52) 对于重-轻介子有某种普遍性，并且可以利用它来设定格距参数 a_t 。当然，使用这一关系前需要注意， ρ 实际上是一个共振宽度相当大的介子，并且几乎 100% 地衰变到 P 波 $\pi\pi$ 态，需要确定得到的质量确实是 ρ 介子而非 $\pi\pi$ 态。在我们的格点上，质心静止系中能量最低的 P 波 $\pi\pi$ 态的阈值为 $2E_\pi(\vec{p})a_t \approx 0.1795$ ，这里考虑 $\xi = 5.3$ ，取最小的 $\vec{n}_p = (0, 0, 1)$ 。在此研究中，无量纲的 π 和 ρ 质量数据分别为 $m_\pi a_t = 0.05055(13)$ 和 $m_\rho a_t = 0.12046(20)$ ，这意味着 $\pi\pi$ 态的阈值实际上高于 $m_\rho a_t$ 。因此静止系中的 ρ 是一个稳定粒子，相应 m_ρ 的数值是可靠的。实践上，我们采用了最小二乘法拟合了 $n\bar{n}$, $n\bar{s}$, $n\bar{c}$ 和 $s\bar{c}$ 的质量平方差实验数据（这里 n 代表 u, d 夸克），得到了平均值 $\overline{\Delta m^2} = 0.568(8) \text{ GeV}^2$ ，将它作为输入给出格距参数 $a_t^{-1} = 6.894(51) \text{ GeV}$ ，相应的空间方向格距 $a_s = 0.1517(11) \text{ fm}$ 。这样，此研究中的 u, d 夸克质量参数给出 $m_\pi = 348.5(1.0)(2.6) \text{ MeV}$ 和 $m_\rho = 830.5(6.3)(6.1) \text{ MeV}$ ，其中第二个括号内是来自 a_t^{-1} 的误差。在大部分内容中，我们都将在物理结果中略去第二项误差，这意味着后文中大多数误差都仅仅是统计误差。为了对这种标度设置方案进行交叉验证，我们还通过 Wilson 圈计算了重夸克静态势，再使用 Sommer 标度参数和空间方向格距关系为 $\frac{r_0}{a_s} = \sqrt{\frac{1.65 - e_c}{\sigma a_s^2}}$ ，这里 e_c 和 σa_s^2 是对静态势做 Cornell 型参数化得到的参数。使用上面得到的 a_t 和 ξ ，我们对 r_0 的估计为 $0.455(3) \text{ fm}$ 。

这种方法是首次提出的，因此需要对其正确性进行检验。除了这个规范

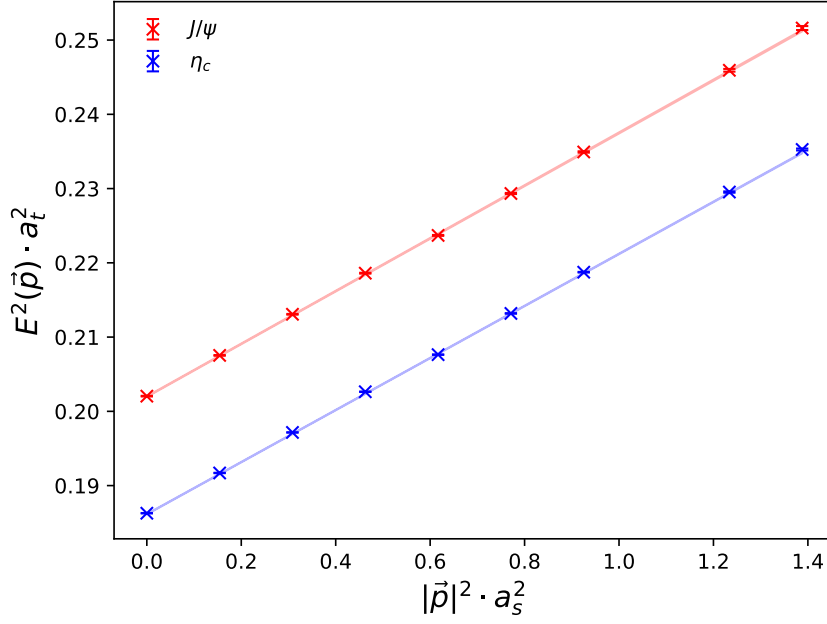


图 2-5 $J/\psi, \eta_c$ 的色散关系

Figure 2-5 The dispersion relations of $J/\psi, \eta_c$. The data points are lattice results and the shaded lines illustrate the fit results using Eq. (2-51). The fitted results of ξ are 5.307(5), 5.341(2) for $J/\psi, \eta_c$, respectively.

系综以外，我们正在产生另外一些 $N_f = 2$ 的格点 QCD 规范系综，它们有不同的夸克质量参数，从而可以给出 $m_\pi = 260 \sim 415$ MeV 范围内的数个 π 介子质量。我们用了上述的质量平方差方法和目前广泛使用的 Wilson 流方法来确定这些系综的格距，图 2-4 展示了使用这两个方法得到的空间格距数值 a_s 随着 m_π 的变化。黑色数据点使用 Wilson 流方法标定，并且使用了物理点处的 w_0 数值（Wilson 流方法中与现实物理相关联的量）。相比于几乎不依赖于夸克质量参数的使用质量平方差关系标定的绿色数据点，Wilson 流方法得到的结果显著地更依赖于 π 介子质量。看起来两种方法标定的 a_s 在随着 m_π 趋近物理值时逐渐接近，我们可以预期它们将在物理点处在误差范围内是一致的。

2.5.2 价粲夸克参数

标定了格距后，可以开始设置价粲夸克的参数。我们采用文章 [163] 中的四叶草费米子作用量形式，粲夸克的质量参数被调整为使得 $(m_{\eta_c} + 3m_{J/\psi})/4 = 3.069$ GeV。我们使用调整完成的粲夸克质量参数在此规范系综上生成了粲夸克的馏分传播子，通过它们可以精确地得到 J/ψ 和 η_c 的质量分别为 $m_{J/\psi} = 3.0988(4)$ GeV 和 $m_{\eta_c} = 2.9750(3)$ GeV，相应的 $1S$ 超精细结构劈裂是 $\Delta_{\text{HFS}} = m_{J/\psi} - m_{\eta_c} = 123.8(5)$ MeV，与实验测量值 $113.0(4)$ MeV^[1] 相差不多。我们也对 J/ψ 和 η_c 检查了色散关系式 (2-51)，动量模式最高到 $\vec{n}_p = (1, 2, 2)$ ，如同图 2-5 中展示的，它们拟合的各向异性为 5.307(5) 和 5.341(2)，与 5.3 偏离在 1% 以下。

表 2-5 $J/\psi, \eta_c, D, D^*$ 的质量

Table 2-5 The masses of $J/\psi, \eta_c, D, D^*$ in GeV. The RPP value of $m_{D^{(*)}}$ is the averaged mass of $D^{(*)0}$ and $D^{(*)+}$. Also gives the fitted ξ value from corresponding dispersion relation.

m_X from	η_c	J/ψ	D	D^*
Our ensemble	2.9750(3)	3.0988(4)	1.882(1)	2.023(1)
RPP ^[1]	2.983	3.097	~ 1.867	~ 2.008
ξ	5.341(2)	5.307(5)	5.32(2)	5.31(3)

为了更进一步地检查我们的标度设置方案, 我们还在系综中的部分组态上计算了 D 和 D^* 介子的质量, 有 $m_D = 1.882(1)$ GeV 和 $m_{D^*} = 2.023(1)$ GeV。有趣的是, 相应的超精细结构劈裂为 $\Delta_{\text{HFS}}(D) = m_{D^*} - m_D = 0.141(2)$ GeV, 这几乎复现了实验上的数值 $m_{D^{*0}} - m_{D^0} = 0.14201(7)$ GeV 和 $m_{D^{*+}} - m_{D^+} = 0.14060(7)$ GeV^[1], 这表明我们对粲夸克质量参数的调整和标度设置方案是合理的。同样的, 我们检查了 D 和 D^* 的色散关系^[164], 它们分别在各向异性为 5.32(2) 和 5.31(3) 时与式 (2-51) 符合, 其图像与图 2-3 和图 2-5 类似, 不再给出。

表 2-5 给出了 $J/\psi, \eta_c, D$ 和 D^* 介子的质量结果。与从 π 和 η 推导得到的各向异性 ξ 相比, 通过上面四种介子得到的 ξ 值全都在 1% 的误差内与调整参数时使用的 $\xi = 5.3$ 吻合。

2.6 自相关

规范组态是在 MCMC 上采样获得的, 而 MCMC 有自相关 (autocorrelation) 的特点^[165]。由于 Markov 链中每一个状态的生成都依赖于上一个状态, 那么显然的这两个状态之间必定存在某种相关性, 反映到最终的 MCMC 中, 某个状态可能与相邻的数个状态也存在相关性。理想情况下一个样本中的各个采样应当是相互独立的, 因此需要引入自相关时间的概念来描述某个来自 MCMC 的样本中实际上相互独立的采样数。在实际的生产过程中, 选择每 10 个径迹选取一个采样, 以此降低组态之间的自相关时间。

2.6.1 积分自相关时间

回忆式 (1-98), 我们使用样本平均来估计积分,

$$\int \mathcal{D}U_\mu P(U_\mu) g(U_\mu) \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g[U_\mu^{(i)}]. \quad (2-53)$$

令第 i 个组态对应的 $g[U_\mu^{(i)}] = g_i$, 这些 g_i 的平均值为 \bar{g} 。若所有采样相互独立, 根据中心极限定理,

$$\bar{g} \sim \mathcal{N}\left[E(g), \frac{1}{N} \text{var}(g)\right]. \quad (2-54)$$

$\text{var}(g)$ 是随机变量的方差，一般采用无偏估计

$$\text{var}(g) \approx \hat{\sigma}^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (g_i - \bar{g})^2. \quad (2-55)$$

但是，当采样不独立时，上式的误差估计是偏小的，引入积分自相关时间（integrated autocorrelation time） τ_{int} [165]，

$$\bar{g} \sim \mathcal{N}\left[E(g), \frac{\tau_{\text{int}}}{N} \text{var}(g)\right], \quad \tau_{\text{int}} = \sum_{t=-\infty}^{\infty} \frac{\lim_{t' \rightarrow \infty} \text{cov}(g_{t'+t}, g_{t'})}{\lim_{t' \rightarrow \infty} \text{var}(g_{t'})}. \quad (2-56)$$

直观理解就是平均每 τ_{int} 采样有一个真正独立的采样。考虑一个有关联的样本 $\{X_i, i \in [1 \dots N]\}$ ，它的均值方差应该是

$$\text{var}(\bar{X}) = \frac{1}{N^2} \sum_{i,j=1}^N \text{cov}(X_i, X_j). \quad (2-57)$$

假设 Markov 链上不同的位置的相关性仅与距离有关，即 $\text{cov}(X_i, X_j) = f(|i-j|)$ ，那么显然有 $\text{var}(X_i) = f(0)$ ，

$$\begin{aligned} \text{var}(\bar{X}) &= \frac{1}{N^2} \sum_{i,j=1}^N f(|i-j|) = \frac{1}{N^2} \sum_{t=-(N-1)}^{N-1} (N-|t|) f(|t|) \\ &= \frac{1}{N} f(0) + \frac{2}{N} \sum_{t=1}^{N-1} \left(1 - \frac{t}{N}\right) f(t). \end{aligned} \quad (2-58)$$

对于相互独立的采样，当 $i > 0$ 时有 $f(i) = 0$ ，

$$\text{var}(\bar{X})_{\text{indep}} = \frac{1}{N} f(0), \implies \hat{\tau}_{\text{int}} = \frac{\text{var}(\bar{X})}{\text{var}(\bar{X})_{\text{indep}}} = 1 + 2 \sum_{t=1}^{N-1} \left(1 - \frac{t}{N}\right) \frac{f(t)}{f(0)}. \quad (2-59)$$

当 $N \rightarrow \infty$ 时与之前 τ_{int} 定义相同。那么我们可以定义对积分自相关时间的估计

$$\begin{aligned} \hat{\tau}_{\text{int}} &= 1 + 2 \sum_{t=1}^{N-1} \left(1 - \frac{t}{N}\right) \frac{1}{f(0)} \frac{1}{N-t} \sum_{i=1}^{N-t} (g_i - \bar{g})(g_{i+t} - \bar{g}) \\ &= 1 + 2 \sum_{t=1}^{N-1} \frac{1}{f(0)} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N-t} (g_i - \bar{g})(g_{i+t} - \bar{g}) \\ &= 1 + 2 \sum_{t=1}^{N-1} \frac{\sum_{i=1}^{N-t} (g_i - \bar{g})(g_{i+t} - \bar{g})}{\sum_{i=1}^N (g_i - \bar{g})(g_i - \bar{g})}. \end{aligned} \quad (2-60)$$

最终对于误差的估计就是 $\hat{\tau}_{\text{int}} \hat{\sigma}^2$ 。需要指出的是， $\hat{\tau}_{\text{int}}$ 的误差将会随着 N 发散，因此通常令对 t 的求和有上限 t_0 ，画出 $\tau_{\text{int}}(t_0)$ 的图，寻找平台来确定合适的 t_0 。

以 $t = 5$ 的静止 π 介子关联函数 $C_{\gamma_5 \gamma_5}^{(2)}(t = 5)$ 为例，采用蒸馏方法计算传播子，绘制的 $\tau_{\text{int}}(t_0)$ 见图 2-6， t_0 上限取到 500，横轴取对数坐标。从图中可以显著地看到有一段曲线较为线性，当这种线性关系结束时，我们认为自相关时间 τ_{int} 已经达到饱和。

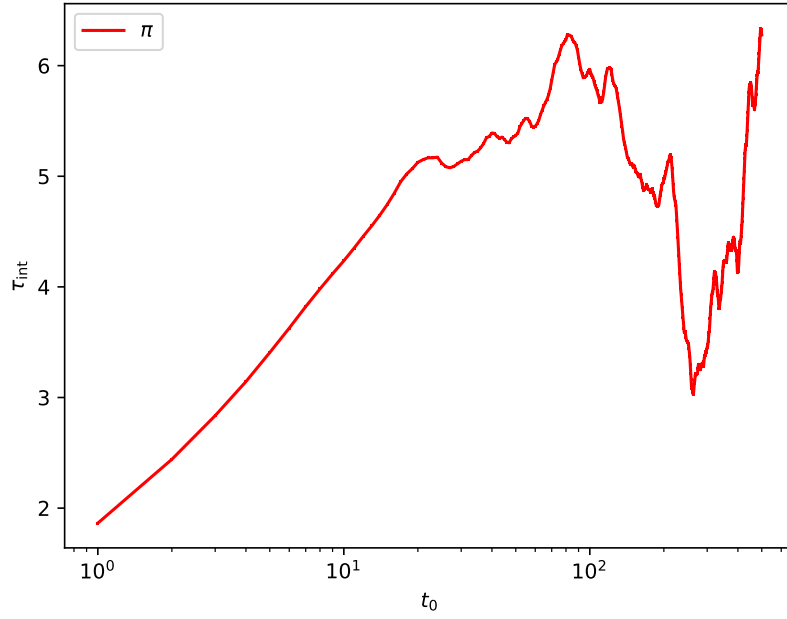


图 2-6 π 介子关联函数的积分自相关时间 $\tau_{\text{int}}(t_0)$ 随 t_0 的变化

Figure 2-6 The integrated autocorrelation time $\tau_{\text{int}}(t_0)$ of two-point correlation function of π , in terms of the integration cutoff t_0 . The time coordinate value of the correlation function is 5.

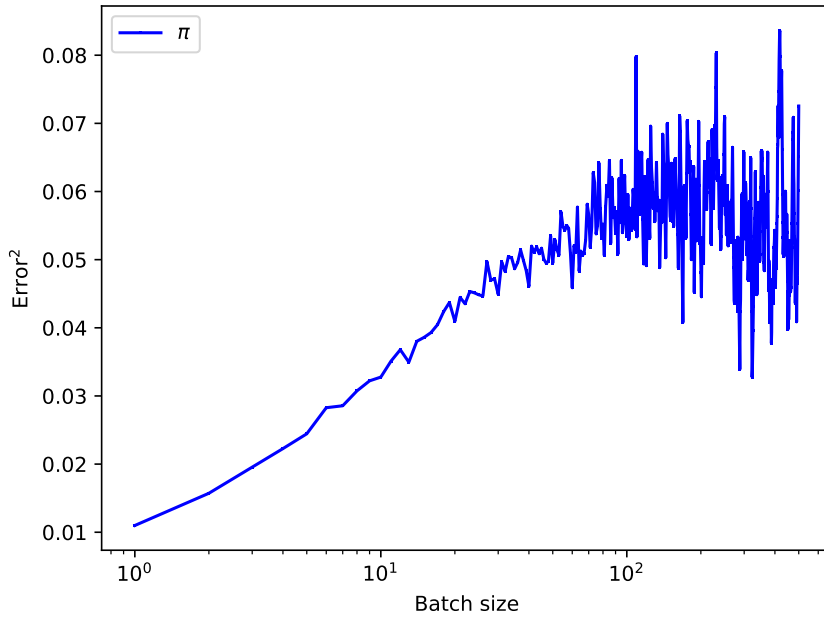


图 2-7 π 介子关联函数的分批平均误差随批尺度的变化

Figure 2-7 The batched mean error of two-point correlation function of π , in terms of the batch size. The time coordinate value of the correlation function is 5.

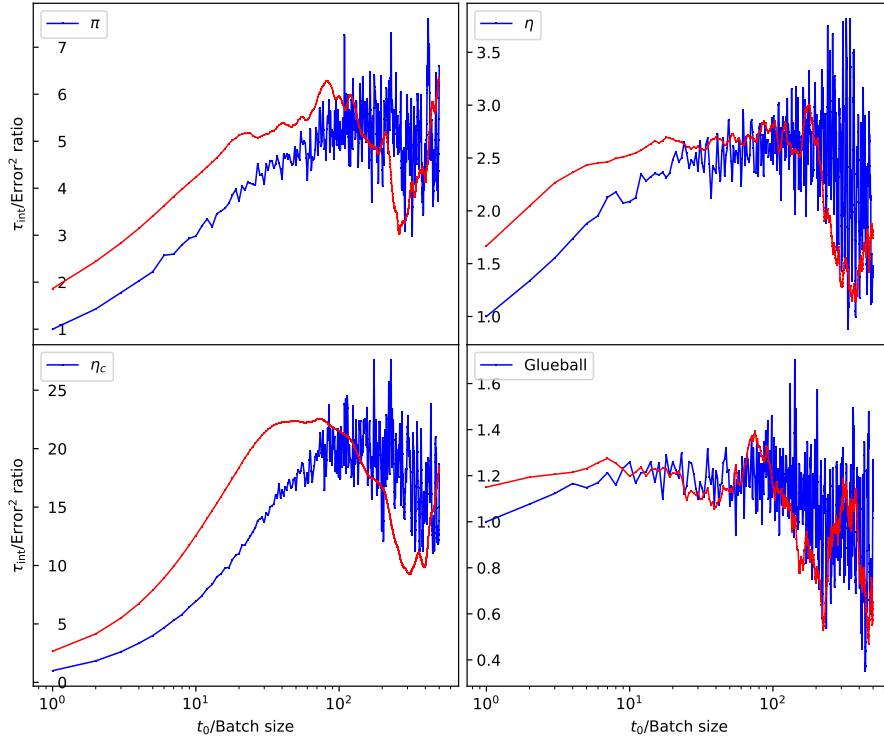


图 2-8 π , η , η_c 介子和赝标量胶球关联函数的积分自相关时间和分批平均误差的变化
 Figure 2-8 The integrated autocorrelation time and batched mean error of correlation functions of π , η , η_c and pseudoscalar glueball.

2.6.2 分批平均

在估计来自 MCMC 的样本误差时，还可以使用分批均值 (batch mean) 的方法。这种方法将 MCMC 上的一段长度为 N 的采样分成均匀的 M 份，对每份中的 N/M 个采样直接取平均值，从而得到了一段长度为 M 的新的采样，直接使用 $\hat{\sigma}^2$ 进行误差估计即可。分批均值考虑若 $N/M \gg \tau_{\text{int}}$ ，那么这新的 M 个采样之间显然几乎没有关联，从而可以使用正常的误差估计来进行后续处理。同样的，由于批尺度 (batch size) N/M 过大时会使得独立采样数量过少，使得误差估计的误差发散，因此需要考虑误差估计关于批尺度 M 的变化关系，在误差估计稳定时确定需要的批尺度。仍然考虑 $t = 5$ 的静止 π 介子关联函数 $C_{\gamma_5 \gamma_5}^{(2)}(t = 5)$ ，对误差的估计见图 2-7，批尺度上限取到 500，同样对横轴取对数坐标，可以看到在某个批尺度以后误差的估计也达到饱和。不难看出，它的走向与图 2-6 非常相似。将图 2-7 整体除以批尺度为 1 的数值，与之画在同一张图中，并添加 η , η_c 以及赝标量胶球两点关联函数在 $t = 5$ 的相应图像，见 2-8。不难发现，分批平均之后获得的误差平方估计提升的倍数基本就是积分自相关时间，即符合式 (2-56)。

2.6.3 可观测量

对于格点 QCD，不同的物理可观测量对应的积分自相关时间并不相同，相应的，需要的批尺度也不同。例如，图 2-8 中不同赝标量介子和胶球的关联函数的自相关时间就有很大的不同： π 大约为 5， η 大约为 2.5， η_c 大约为 20，而胶球只有大约 1.2。另外，同一个关联函数在不同 t 的自相关时间也有不同。总的来看，至少对于赝标量粒子的关联函数，越重的夸克传播子相关的观测量将会给出越大的自相关时间（如 η_c ），而越与规范场相关的观测量则给出越小的自相关时间（如 η 的夸克湮灭图贡献和胶球）。

综合考虑我们的物理目标，粲介子偶素拥有最长的自相关时间，因此在后续的研究中选定了批尺度 50，这时粲介子偶素的误差已经大致饱和了。

2.7 QUDA 的 Python 接口

为了方便研究，我们开发了 PyQuda 软件，这是一个使用 Cython^[166] 实现的 QUDA^[97, 167-168] 在 Python^[169] 中的包装通过结合了 NumPy 数值计算库^[170]，SciPy 科学计算库^[171]，以及它们的一个 CUDA^[172] 的实现 CuPy^[173]，极大地加速了夸克传播子和关联函数的计算，特别在蒸馏方法^[87] 相关的工作流中，包括部分求解本征谱，张量缩并，内插局域流算符等，提升了计算速度，为我们提供了许多便利。

2.7.1 Chroma 程序输入参数

现在考虑计算程序的具体实现。目前我们主要使用的软件是由 USQCD 组织开发的 Chroma^[25] 套件和 Nvidia 支持开发的 QUDA^[97, 167-168] 加速库。Chroma 是一套运行在 CPU 上的，包含有大量的作用量实现，被全世界的研究者广泛使用的格点 QCD 计算软件，目前由 Jefferson 国家实验室进行维护工作。我们的大部分工作，包括组态生成和计算夸克传播子，都是通过 Chroma 软件完成的。尽管现在也开始单纯使用 QUDA 进行传播子计算，但想要完全替代 Chroma 还需要不短的时间。这些软件有各自的输入参数限制，例如在 QUDA 中，我们无法分别设置 Wilson 项的时间和空间分量系数，但两者之间相差了一个系数 $\frac{\nu}{u_s \xi_0}$ 。因此需要使用一些变换技巧，通过更改输入的数据和参数来将作用量变为各向同性的形式，使其能够正常处理各向异性的费米子作用量。

现在写下 Chroma 中 Symanzik 改进的规范作用量形式（来自 Morningstar 和 Peardon 胶球谱计算文章^[68] 中的公式 (4)），

$$S_g(U_\mu) = \frac{\beta}{N_c \xi_0} \sum_x \sum_{i < j} \left[\frac{5}{3u_s^4} P_{ij}(x) - \frac{1}{12u_s^6} R_{ij}(x) - \frac{1}{12u_s^6} R_{ji}(x) \right] + \frac{\beta \xi_0}{N_c} \sum_x \sum_i \left[\frac{4}{3u_s^2} P_{i4}(x) - \frac{1}{12u_s^4} R_{i4}(x) \right], \quad (2-61)$$

$$\beta = \frac{2N_c}{g}, \quad P_{ij} = -\text{ReTr} W_{\mu\nu}^{1 \times 1}, \quad R_{\mu\nu} = -\text{ReTr} W_{\mu\nu}^{2 \times 1}. \quad (2-62)$$

其中 N_c 是 QCD 理论中颜色的数量。它与形式 (1-85) 几乎是一样的。 $P_{\mu\nu}$ 和 $R_{\mu\nu}$ 的定义与之前略有不同，去掉了常数项。在后面的 2.2.3 小节会说明，实际上我们只关心在规范链接变化后规范作用量的改变值，因此这些与规范链接无关的常数项是可以被忽略的。另外该式与原文中的形式略有不同，因为我们没有采用原文中为了将作用量改进推到 $\mathcal{O}(a_s^4)$ 而引入的 ω 。

现在写下 Chroma 中默认的四叶草作用量形式（来自 SZIN 约定，见 Chroma 的 docs/notes/anisoHQ.tex 文档），

$$2\kappa a_t \mathcal{M} = 1 - \kappa \left[c_{\text{SW}}^t \sum_i \sigma_{i4} \hat{F}_{i4} + \frac{c_{\text{SW}}^s}{\xi_0} \sum_{i<j} \sigma_{ij} \hat{F}_{ij} + \gamma_4 W_4 + \frac{\nu}{\xi_0} \sum_i \gamma_i W_i \right]. \quad (2-63)$$

$$\kappa = \frac{1}{2 \left(m_0 + 1 + 3 \frac{\nu}{\xi_0} \right)}. \quad (2-64)$$

将它展开为矩阵形式后与尚未应用蝌蚪图改进的四叶草作用量 (1-79) 非常相似，各系数定义也与前文相同。但是由于这个形式没有办法直接采用 u_s 输入，因此需要将其吸收入 $\nu, \xi_0, c_{\text{SW}}^t, c_{\text{SW}}^s$ 之中。实践中，我们需要选择 m_0 和 κ 之一输入，对应的另一个系数可以通过简单的运算得到。

对于四叶草作用量，我们有形式 (1-86)，我们注意到空间方向的 Wilson 算符前的系数 $\frac{\nu}{\xi_0}$ 无法与 $\frac{\nu}{u_s \xi_0}$ 匹配。Chen 认为^[63]，蝌蚪图会在树图阶给各向异性 ξ_0 贡献一个重整化因子，使得重整化的各向异性 $\xi' = \frac{u_s}{\xi_0} \xi_0$ ，而这一数值与 Klassen 在纯规范场的各向异性重整化系数研究中^[60]得到的数值在 2% 精度上一致。那么对费米子作用量应用蝌蚪图改进时需要使用 ξ' 作为各向异性参数。

$$\begin{aligned} 2\kappa a_t \mathcal{M} = & \left[1 - \frac{\kappa}{2u_s^2} \left(\nu + \frac{1}{\xi'} \right) \sum_i \sigma_{i4} \hat{F}_{i4} - \frac{\kappa}{u_s^4} \frac{\nu}{\xi'} \sum_{i<j} \sigma_{ij} \hat{F}_{ij} \right] \delta_{x,y} \\ & - \kappa \left[(1 - \gamma_4) U_4(x) \delta_{x+\hat{4},y} + (1 + \gamma_4) U_4(x - \hat{4}) \delta_{x-\hat{4},y} \right] \\ & - \frac{\kappa}{u_s} \frac{\nu}{\xi'} \sum_i \left[(1 - \gamma_i) U_i(x) \delta_{x+i,y} + (1 + \gamma_i) U_i(x - i) \delta_{x-i,y} \right]. \end{aligned} \quad (2-65)$$

恰好可以将多余的 u_s 吸收，

$$\begin{aligned} 2\kappa a_t \mathcal{M} = & \left[1 - \frac{\kappa}{2u_s^2} \left(\nu + \frac{u_s}{\xi_0} \right) \sum_i \sigma_{i4} \hat{F}_{i4} - \frac{\kappa}{u_s^3} \frac{\nu}{\xi_0} \sum_{i<j} \sigma_{ij} \hat{F}_{ij} \right] \delta_{x,y} \\ & - \kappa \left[(1 - \gamma_4) U_4(x) \delta_{x+\hat{4},y} + (1 + \gamma_4) U_4(x - \hat{4}) \delta_{x-\hat{4},y} \right] \\ & - \kappa \frac{\nu}{\xi_0} \sum_i \left[(1 - \gamma_i) U_i(x) \delta_{x+i,y} + (1 + \gamma_i) U_i(x - i) \delta_{x-i,y} \right]. \end{aligned} \quad (2-66)$$

对比 (2-63)，现在可以写出各项的组合系数

$$c_{\text{SW}}^t = \frac{1}{2u_s^2} \left(\nu + \frac{u_s}{\xi_0} \right), \quad c_{\text{SW}}^s = \frac{1}{u_s^3}. \quad (2-67)$$

这样我们拥有了一套适配 Chroma 输入参数的树图阶改进 QCD 作用量的形式。

2.7.2 API 绑定

在 PyQuda 的实现中，我们通过 Cython 静态地将 QUDA 库导出的 C API 绑定到 Python 中，以使我们能够在脚本中直接调用 QUDA 中的函数。QUDA 的 C API 完全通过头文件 `include/quda.h` 导出，几乎所有函数都只接受裸指针以及参数指针，有少量函数有数个直接传入的参数。这一步需要引入 QUDA 的三个头文件：`quda_constant.h`，`enum_quda.h` 和 `quda.h`，它们分别定义了 QUDA 运行需要的少数常数，所有用于实例化具体模板参数的枚举类型，以及所有可供 C 程序使用的 QUDA 函数。通过将它们转写到对应的 `*.pxd` 文件，以使得后续 Cython 程序能够调用这些头文件中的定义和声明。这种转写过程相对简单，只是一些语法上的适配工作，唯一的麻烦是这些头文件定义的变量和函数非常多，整个流程比较繁琐。在初版完成后，后续添加 API 将会变得简单很多。

由于 C API 大部分情形下接受裸指针和参数结构体指针作为参数输入，因此在 Cython 中定义了一种裸指针在 Python 中的包装（这样指针变量可以在 Python 中保留和传递），并建立了一种从 `ndarray` 格式提取连续数组内存地址的方案。NumPy 数组指针通过 `numpy.ndarray.ctypes.data` 获得，CuPy 数组指针通过 `cupy.ndarray.data.ptr` 获得。需要注意的是，它们都是 Python 中的 `int` 对象类型，由于 Cython 不支持直接从 Python 对象转换到指针类型，因此需要定义一个 `size_t` 类型的 C 变量作为中间变量才能完成强制类型转换。上述的内容定义在 `pyquda.pyx` 中，还有一些基本的从 Python 对象和 C 类型之间的基本转换也定义于此。另外，文件中有大量内容消耗在定义 QUDA 参数结构体上，例如 `QudaGaugeParam` 和 `QudaInvertParam`，包括它们的存储，打印，以及参数的取值和赋值。由于 Cython 的一些限制，只能通过不断地定义 `@property` 和 `@name.setter` 来完成参数的读出写入，使得文件过大，但实际上大部分都是重复性的工作，我们借助于一些正则匹配的手段完成了它。特别的，其中涉及到指针的变量需要一个额外的辅助函数以实现与 `Pointer` 的转换。

2.7.3 场顺序约定

由于关于场变量的指针都是裸的，因此需要用户自行构造其内部结构。例如常用的函数

```

1 /**
2  * Perform the solve, according to the parameters set in param. It
3  * is assumed that the gauge field has already been loaded via
4  * loadGaugeQuda().
5  * @param h_x      Solution spinor field
6  * @param h_b      Source spinor field
7  * @param param    Contains all metadata regarding host and device
8  *                storage and solver parameters
9  */
void invertQuda(void *h_x, void *h_b, QudaInvertParam *param);

```

需要传入源向量指针 `h_b` 和参数结构体指针 `param`，将结果写回解向量指针 `h_x`。源向量和解向量含有时空指标，Dirac（旋量）指标，颜色指标，应当采用奇偶预处理的形式存储，即为 `[parity][Lt][Lz][Ly][Lx/2][Ns][Nc]` 形状的复数数组。这其实是枚举类型 `QudaDiracFieldOrder` 中 `QUDA_DIRAC_ORDER` 对应的场顺序，意味着在采用这种顺序的场作为输入时需要将 `param->dirac_order` 项设置为相应值。实际上 QUDA 在进行计算时会将场重新排列成需要的形式，这与具体的作用量和精度有关。类似的，在将规范组态加载到 QUDA 中时也有类似的问题，

```

2  /**
   * Load the gauge field from the host.
   * @param h_gauge Base pointer to host gauge field (regardless of dimensionality)
   * @param param   Contains all metadata regarding host and device storage
   */
6 void loadGaugeQuda(void *h_gauge, QudaGaugeParam *param);

```

`param->gauge_order` 为枚举类型 `QudaGaugeFieldOrder`，由于之前使用的代码大都基于 Chroma/QDPXX 体系，因此我们采用 `QUDA_QDP_GAUGE_ORDER` 作为输入。在 QDPXX 中，规范组态被表达为一个长度为 4 的指针数组，每个指针指向某个方向上的规范链接，具体顺序为 `[parity][Lt][Lz][Ly][Lx/2][Ncr][Ncc]`，最后将这个指针数组的地址作为 `h_gauge` 参数输入。在使用 QDP 类型的参数时，需要在编译时启用 `QUDA_INTERFACE_QDP` 编译选项。

以上两种结构被包装在了 `LatticeFermion` 和 `LatticeGauge` 中，包含了必要的参数。

2.7.4 MPI 多卡并行

QUDA 支持直接使用 MPI 环境进行多卡并行计算，需要在编译时启用选项 `QUDA_MPI`。在 Python 中，有对 MPI 的包装库 `mpi4py`^[174]，可以直接完成 MPI 中的大部分操作，这样我们就能够从 Python 中调用 MPI 版本的 QUDA 进行并行计算。在格点的所有边长都是偶数的情况下，可以直接对场变量的奇偶部分进行拆分，而不会影响拆分前后的奇偶性。某个进程具体负责的时空格点部分由如下操作给出，

```

comm = MPI.COMM_WORLD
2 rank = comm.Get_rank()
  size = comm.Get_size()
4
  Gx, Gy, Gz, Gt = grid_size
6 assert len(grid_size) == 4 and Gx * Gy * Gz * Gt == size
  coord = [rank // Gt // Gz // Gy, rank // Gt // Gz % Gy, rank // Gt % Gz, rank % Gt]

```

`coord` 即序号为 `rank` 的进程在时空格点均匀划分后负责的块坐标。这实际上是 Chroma/QDPXX 默认的格点划分策略。

2.7.5 四叶草项

对于我们使用的各向异性的四叶草费米子作用量，在 Chroma 软件的实现中，四叶草项是在 CPU 上使用 QDPXX 直接计算后通过 `loadCloverQuda` 接口直接传入 QUDA，而 QUDA 实际上拥有计算四叶草项的能力。`loadCloverQuda` 声明为

```
1 /**
   * Load the clover term and/or the clover inverse from the host.
   * Either h_clover or h_clovinv may be set to NULL.
   * @param h_clover Base pointer to host clover field
   * @param h_cloverinv Base pointer to host clover inverse field
   * @param inv_param Contains all metadata regarding host and device storage
   */
2 void loadCloverQuda(void *h_clover, void *h_clovinv, QudaInvertParam *inv_param);
```

这里的 `h_clover` 和 `h_clovinv` 都可以直接传入 QUDA，当这两项为空指针并设置 `inv_param->compute_clover` 和 `inv_param->compute_clover_inverse` 为 1 时，四叶草项和它的逆则在 QUDA 中通过已经加载完成的规范组态被计算并存储。但这种方式有很大的限制，因为 QUDA 不支持生成各向异性的四叶草项。这时，通过将空间方向的规范链接除以一个系数 ξ_{SW} ，并依照 ξ_0 ， c_{SW}^s 和 c_{SW}^t 重新生成 c_{SW} ，参照式 (2-63)，

$$\frac{c_{\text{SW}}^s}{\xi_0} = \frac{c_{\text{SW}}}{\xi_{\text{SW}}^4}, \quad c_{\text{SW}}^t = \frac{c_{\text{SW}}}{\xi_{\text{SW}}^2}. \quad (2-68)$$

通过一些简单的代数计算就可以产生我们需要的四叶草项参数，

$$c_{\text{SW}} = \xi_0 \frac{c_{\text{SW}}^{t2}}{c_{\text{SW}}^s}, \quad \xi_{\text{SW}} = \sqrt{\xi_0 \frac{c_{\text{SW}}^t}{c_{\text{SW}}^s}}. \quad (2-69)$$

2.7.6 求逆

有了上面的准备后，我们可以开始尝试在 Python 中调用 QUDA 的函数求解线性方程组。整体过程参考 QUDA 的 `invert_test.cpp` 文件，不同作用量的默认参数设置被可以在 `dslash` 中找到。这里需要设置的参数多且需要仔细考虑，不同过程也需要临时更改参数值。对于四叶草作用量对应的求解器，需要求解的是奇偶预处理之后的线性方程组 (1-166)，具体形式依照不同的奇偶分解方案有变化。特别注意，在 QUDA 中，奇偶预处理的 `dslashQuda` 函数实际上完成了 $A_{ee}^{-1} D_{eo}$ 或者 $A_{oo}^{-1} D_{oe}$ 操作，因此实际上我们需要采用对称形式的奇偶预处理，例如 (1-171)，考虑这一点后有一些额外的处理，

```
1 cloverQuda(tmp.even_ptr, b.even_ptr, invert_param, QudaParity.QUDA_EVEN_PARITY, 1)
2 cloverQuda(tmp.odd_ptr, b.odd_ptr, invert_param, QudaParity.QUDA_ODD_PARITY, 1)
   tmp.data *= 2 * kappa
3 dslashQuda(tmp2.odd_ptr, tmp.even_ptr, invert_param, QudaParity.QUDA_ODD_PARITY)
4 tmp.odd = tmp.odd + kappa * tmp2.odd
```



```

6 invertQuda(x.odd_ptr, tmp.odd_ptr, invert_param)
  dslashQuda(tmp2.even_ptr, x.odd_ptr, invert_param, QudaParity.QUDA_EVEN_PARITY)
8 x.even = tmp.even + kappa * tmp2.even

```

这里的 2κ 系数涉及到一些质量参数归一化的约定，与线性方程组形式有关，上述例程在 `param->mass_normalization` 设置为 `QUDA_KAPPA_NORMALIZATION`，`invert_param->matpc_type` 设置为 `QUDA_MATPC_ODD_ODD` 时有效。

2.7.7 HMC

回忆式 (2-27)，现在仅考虑纯规范场（淬火近似），Hamiltonian 中后两项消失，

$$\mathcal{H}^{\mu\nu} = \frac{1}{2} \sum_{x,\mu} \text{Tr} [\pi_\mu(x) \pi_\mu(x)] + S_g(U_\mu), \quad (2-70)$$

算法 6 中的相应项也应该消失，相应的 PyQuda 代码见附录一。这份代码实现了一个周期性边界条件下的纯规范 HMC 过程，使用了一个 OMF 4 阶积分器^[122]，实现了 Symanzik 改进的规范作用量以及提取相应规范力的过程，每一次积分完毕后将规范场重新投影回 SU(3) 的，实现了一定长度的预热过程。程序给出了 4 种组态配置，小方格的数值结果最终与文章^[175-176]中对应编号的结果一致，这可以证明使用 PyQuda 完成纯规范 HMC 是可行的。

在纯规范的 HMC 程序中，主要使用了 `computeGaugeForce` 和 `updateGaugeField` 两个函数，对于含有四叶草作用量的动力学 HMC 过程，还需要使用 `computeCloverForce` 函数，但目前为止由于缺少测试覆盖，这个函数在 QUDA 中是无法运行的，需要修正，这也是 PyQuda 下一步的目标。另外，QUDA 尚未实现 PHMC 或 RHMC 必须的步骤，因此不能模拟奇数味道的夸克。

2.7.8 半馏分传播子

在 J/ψ 辐射衰变到 1^{-+} 混杂态的相关性质研究中^[177]，由于运动的 1^{-+} 量子态算符无法耦合到稳定的角动量态^[155]，并且 1^{-+} 并不是所有角动量态中最轻的一个，因此我们不得不考虑 1^{-+} 静止的运动学配置。这样，初态 J/ψ 介子和末态光子都需要给出特定的动量。由于相关矩阵元的多极分解依赖于动量的各个分量，使得绝对值相同但方向不同的各个动量不可能预先被平均，这意味着需要求解的两点关联函数 $\langle j_{\text{em}}^\mu(\vec{p}) \mathcal{O}_{J/\psi}^i(\vec{p}) \rangle$ 数量将会与需要的动量数量成正比，其中 $j_{\text{em}}^\mu = \bar{c} \gamma_\mu c$ ， $\mathcal{O}_{J/\psi}^i = \bar{c} \gamma_i c$ ，在 $|\vec{n}_p| = 3$ 的情形下，会有 123 种可选的动量。

根据两点关联函数的形式，我们首先采用了体积源的计算方案，具体的计算方法见 1.5.1 小节。尽管两点函数给出了不错的结果，但是一旦与 1^{-+} 的圈耦合，信噪比将会非常糟糕，无法从中抽取辐射衰变的矩阵元。之后我们考虑采用蒸馏方法，因为这是一种估计全传播子的方案，理论上可以给出更好的信噪比。最初，我们考虑直接在两点关联函数中采用涂摩后的粲夸克场。这里需要注意

的是,这会导致流重整化系数 Z_V ^[178-179] 需要重新计算,而蒸馏方法的涂摩方案又导致了对不同动量的夸克场涂摩强度不同,这就需要分别计算不同动量下的 Z_V ,非常繁琐。在我们意识到这个问题后,最终在计算中采用了保持流算符局域的方式。所有计算均在 PyQuda 框架中完成。

考虑涂摩后的 $\mathcal{O}_{J/\psi}^i$ 算符和局域的 j_{em}^μ 算符进行 Wick 收缩,

$$\begin{aligned} \bar{c}(x)\gamma^\mu c(x)\bar{c}^{(s)}(y)\gamma^i c^{(s)}(y) &= \text{Tr} [\gamma^\mu S(x, y')(VV^\dagger)_{y'y}\gamma^i(VV^\dagger)_{yy''}S(y'', x)] \\ &= \text{Tr} [\gamma^\mu (\mathcal{M}^{-1}V)_{xk}V_{ky}^\dagger\gamma^i V_{yl}(V^\dagger\mathcal{M}^{-1})_{lx}] \\ &= \text{Tr} [\gamma^\mu (\mathcal{M}^{-1}V)_{xk}V_{ky}^\dagger\gamma^i V_{yl}(\gamma_5\mathcal{M}^{-1}\gamma_5V)_{lx}^\dagger] \\ &= \text{Tr} [\gamma_5\gamma^\mu (\mathcal{M}^{-1}V)_{xk}V_{ky}^\dagger\gamma^i V_{yl}(\mathcal{M}^{-1}V)_{lx}^\dagger], \end{aligned} \quad (2-71)$$

上式对除了 x, y 的所有指标求和,其中 k, l 是选用的本征向量指标。对 y 做 Fourier 变换后,

$$\begin{aligned} j_{\text{em}}^\mu(\vec{p})\mathcal{O}_{J/\psi}^i(\vec{p}) &= \sum_{\vec{x}, \vec{y}} e^{-i\vec{p}\cdot(\vec{x}-\vec{y})} \text{Tr} [\gamma_5\gamma^\mu (\mathcal{M}^{-1}V)_{xk}V_{ky}^\dagger\gamma^i V_{yl}(\mathcal{M}^{-1}V)_{lx}^\dagger] \\ &= \sum_{\vec{x}} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}} \text{Tr} [\gamma_5\gamma^\mu (\mathcal{M}^{-1}V)_{xk}\phi(\vec{p}, y_4, \gamma^i\gamma_5)(\mathcal{M}^{-1}V)_{lx}^\dagger], \end{aligned} \quad (2-72)$$

这里 ϕ 采用了类似 1.5.2 小节中的记号。那么需要计算 $A = \mathcal{M}^{-1}V$, 之后计算 $\sum_{\vec{x}} A_{mx}^\dagger e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}} A_{xn}$ 。这个过程总共需要 $N_{\text{cfg}} \times N_{\text{eig}} \times L_t \times N_s$ 次线性方程组求解,为了节约算力和显存,选取了 $N_{\text{eig}} = 50$, 求解次数大约为 1800 万次。

这一过程中,PyQuda 可以方便地生成不同方向的动量相位,使用 QUDA 求解线性方程组,并通过 CuPy 的 `einsum` 函数进行张量缩并。这也是首个使用 PyQuda 计算的有实际意义的项目。

2.7.9 本征向量作为序列源

在粲介子偶素辐射衰变到 J/ψ 的研究中(文章准备中),同样的需要计算三点函数以抽取相应矩阵元。与上一小节中的讨论类似,初末态粲介子偶素使用涂摩后的算符构造,流算符则采用局域的形式。

$$\begin{aligned} \bar{c}^{(s)}(x)\Gamma_A c^{(s)}(x)\bar{c}(y)\gamma^\mu c(y)\bar{c}^{(s)}(z)\Gamma_A c^{(s)}(z) \\ &= \text{Tr} [\Gamma_A(VV^\dagger)_{xx'}S(x', y)\gamma^\mu S(y, z')(VV^\dagger)_{z'z}\Gamma_B(VV^\dagger)_{zz''}S(z'', x'')(VV^\dagger)_{x''x}] \\ &= \text{Tr} [\phi(x_4, \Gamma_A)_{kk'}V_{k'x'}^\dagger S(x', y)\gamma^\mu S(y, z')V_{z'l}\phi(z_4, \Gamma_B)_{ll'}V_{l'z''}^\dagger S(z'', x'')V_{x''k}] \\ &= \text{Tr} [\phi(x_4, \Gamma_A)_{kk'}V_{k'x'}^\dagger \mathcal{M}_{x'y}^{-1}\gamma^\mu \mathcal{M}_{yz'}^{-1}V_{z'l}\phi(z_4, \Gamma_B)_{ll'}\tau(z_4, x_4)_{l'k}]. \end{aligned} \quad (2-73)$$

上式对除了 x, y, z 的所有指标求和。除去已有的馏分传播子 τ 和元算符 ϕ , 剩余一个 $V_{k'x'}^\dagger \mathcal{M}_{x'y}^{-1}\gamma^\mu \mathcal{M}_{yz'}^{-1}V_{z'l}$ 需要求解。这种类型的传播子通常采用序列源的方法进行计算。首先将 V 作为源,通过 $N_{\text{eig}} \times N_d$ 次的线性方程组求解得到 $\mathcal{M}^{-1}V$,

对这一形式在汇上添加相应动量相位，应用 γ_μ ，再作为源输入求解器，就可以得到 (x, l) 处的元素

$$\sum_{\vec{y}} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{y}} \mathcal{M}_{xy}^{-1} (\mathcal{M}^{-1} V)_{yl}, \quad (2-74)$$

最终与 V^\dagger 相乘，得到 (k, l) 处的元素

$$\sum_{\vec{y}} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{y}} (V^\dagger \mathcal{M}^{-1})_{ky} (\mathcal{M}^{-1} V)_{yl}, \quad (2-75)$$

这正是我们想要的形式。这种对某个源求解得到传播子后，再将传播子重新作为源的方案就是序列源的基本思路。通常，这种方案在连通图贡献的三点或更高阶的关联函数中有重要应用。同样的，PyQuda 可以依靠 CuPy 数组的操作方便地将某个传播子重新作为源输入到 QUDA 中。

2.8 小结

本章主要介绍了我们依托自有的计算资源在一个 $L_s^3 \times L_t = 16^3 \times 128$ 大小的各向性格点上产生的含有 $N_f = 2$ 简并的动力学 u, d 夸克的规范系综，总共含有 6991 个组态。我们采用了 Symanzik 规范作用量和四叶草费米子作用量，并应用了蝌蚪图改进。作用量中各项参数给出各向异性 $\xi = a_s/a_t \approx 5.3$ ， $m_\pi \approx 350$ MeV。

首先，我们使用格点上的旋转对称群是立方点群 O 这一特点，以及简单的内插场算符的量子数性质，通过连续时空下旋转对称群 $SO(3)$ 到 O 的分导表示构造了一些格点上的赝标量介子算符，都可以耦合到不同的 0^{-+} 态。通过这些算符，我们可以计算味道单态和味道多重态赝标量介子的两点关联函数。接着我们求解不同算符之间的两点关联函数的 GEVP（变分法），得到了一系列不同动量下能够更多地耦合到基态同位旋单态赝标量介子的优化算符。通过这些优化算符的两点关联函数可以抽取不同动量下介子的能量，根据色散关系就可以验证各向异性 ξ 的数值。最终，对于这个规范系综上的 π （味道多重态赝标量介子）和 η （味道单态赝标量介子）的色散关系进行拟合，得到相应的各向异性参数为 5.365(5) 和 5.34(3)，在 1% 左右的精度上与 5.3 保持一致。

接下来需要标定时间方向格距，这是从格点单位转换到物理单位的桥梁。我们采用了一种全新的定标方案，即利用轻 $q\bar{q}$ 和重味赝标量介子和矢量介子的质量平方差接近常数 $\Delta m^2 = 0.568(8) \text{ GeV}^2$ 来确定格距。这是一个经验公式，与夸克质量不敏感，实践上使用了 $q\bar{q}$ ， $q\bar{s}$ ， $q\bar{c}$ ， $s\bar{c}$ 组分的介子质量实验值来估计这个常数。这样我们给出 $a_t^{-1} = 6.894(51) \text{ GeV}$ ， $a_s = 0.1517(11) \text{ fm}$ ，有了格局之后就得到了 $m_\pi = 348.5(1.0)(2.6)$ 和 $m_\rho = 830.5(6.3)(6.1)$ 。由于这种方法是首次提出，我们还通过产生其他不同 π 介子质量的 $N_f = 2$ 的规范系综，使用质量平方差方法和传统的 Wilson 流方法分别估计其格距，发现它们的结果在手征极限下是相符的，并且质量平方差方法对夸克质量参数的依赖更弱。之后，我们采用四

叶草费米子作用量调整了价夸克的质量参数，给出 $m_{J/\psi} = 3.0988(4)$ GeV 和 $m_{\eta_c} = 2.9750(3)$ GeV。我们额外检查了 η_c , J/ψ , D , D^* 介子的色散关系，通过它们抽取的各向异性在 1% 的误差内与 5.3 相符。

由于组态通过 MCMC 在系综上采样产生，组态之间天然的存在自相关，通过统计的手段我们可以得到一个衡量自相关的参数积分自相关时间。我们检查了 π , η , η_c 和赝标量胶球的两点关联函数的积分自相关时间，认为更轻的夸克传播子和规范成分将会使得自相关时间降低。之后我们引入分批均值的方法简化误差分析的流程，给出以 50 个数据为一组进行刀切法误差估计的方案，这时自相关引起的误差估计偏低基本已经消除。

第3章 $N_f = 2$ 格点 QCD 中 $\eta_{(2)}$ 介子与胶球的混合

我们首次在 $N_f = 2$ 的格点 QCD 中进行了同位旋单态赝标量介子 $\eta_{(2)}$ 和赝标量胶球的混合相关的研究，这里 $\eta_{(2)}$ 是 $N_f = 2$ 下味道 SU(2) 对称性中的同位旋单态赝标量介子。生成组态时的夸克质量参数对应的 π 介子质量 $m_\pi \approx 350$ MeV。 $\eta_{(2)}$ 介子质量被确定为 $m_{\eta_{(2)}} = 714(6)(16)$ MeV。通过 Witten-Veneziano 机制，这一数值可以推导出 3 味夸克情形下与 $\eta_{(2)}$ 介子相对应的介子质量大约为 981 MeV。基于一个统计量很大的规范系综， $\eta_{(2)}$ -胶球的混合能量和混合角分别被确定为 $|x| = 107(15)(2)$ MeV 和 $|\theta| = 3.46(46)^\circ$ ，这些数值都是通过蒸馏方法计算 $\eta_{(2)}$ -胶球的两点关联函数得到的。我们认为 $\eta_{(2)}$ -胶球混合效应微弱，并且由于 QCD 的 $U_A(1)$ 反常，拓扑诱导的相互作用对 η 介子质量贡献很大。

3.1 背景介绍

手征对称性是 QCD 在夸克零质量极限下的一种内禀对称性，并且由于非零夸克凝聚而自发破缺。从 $SU_L(3) \times SU_R(3)$ 到味道 SU(3) 的自发对称性破缺 (spontaneous symmetry breaking, SSB) 产生了八个 Goldstone 粒子，被分类为由 $\{\pi, K, \eta_8\}$ 构成的赝标介子八重态，由于较小的 u, d, s 夸克质量，这些态都具有一定的质量。如果 SSB 同样适用于 $U_L(1) \times U_R(1)$ 的手征对称性，那么它会破缺到 $U_V(1)$ ，对应于重子数守恒预计会存在一个额外的 Goldstone 粒子，也就是一个轻的味道单态赝标量介子。 η' 介子主要是味道单态，但其质量太大，不能被当作这个 Goldstone 粒子的候选者。 η' 质量问题与 QCD $U_A(1)$ 反常有直接的关系，即反常的胶子项（拓扑荷密度）即使在手征极限下仍然会打破味道单态轴矢流守恒。尽管反常的轴矢流关系可以被写成一个规范变的轴矢流的散度，它是零就意味着 $U_A(1)$ 对称性，Kogut 和 Susskind 指出^[180] 它的自发破缺会生成一个违反 Gell-Mann-Okubo (GMO) 关系的无质量的模式，然后使得 η' 更重。关于 QCD 真空的非平凡拓扑结构，Witten^[181] 和 Veneziano^[182] 提出了一种 η' 质量来源机制，即拓扑荷密度和味道单态赝标量的非微扰耦合引入了一种 m_0^2 的自能修正，它与规范场拓扑磁化率 χ 成正比。使用物理的 η' 质量， χ 的值大约在 $(180 \text{ MeV})^4$ ，这也与格点 QCD 的计算相符^[183]。 η' 另一个有趣的性质是它在 J/ψ 辐射衰变中有巨大的产率^[1]，而这一过程富含胶子并预计有利于胶球的产生。这一观察与 η' 的质量来源机制都表现了 η' 与胶子的强耦合性，从而促使人们猜想 η' 可能与赝标量胶球有很大的混合，因为它们有相同的量子数。KLOE 合作组分析了 $\phi \rightarrow \gamma\eta$ 和 $\phi \rightarrow \gamma\eta'$ 过程，发现考虑 η' -胶球的混合可能是有必要的，并且混合角可以达到 $22 \pm 3^\circ$ ^[184]。相比之下，另一个对 KLOE 结果的唯象分析给出了混合角 $12 \pm 13^\circ$ ，这在误差范围内为零^[185]。一个对 $J/\psi(\psi')$ 介子衰变到一个赝标量和一个矢量末态的唯象分析获得了一个在 9° 左右的 η' -胶球混合角，这考虑了 η - η' -胶球混合模型^[186]。显然，上述几个分析确定的混合角在相当大的范围

内变化。基于 η' -胶球混合的图像，已经有了关于 $\eta(1405)$ 作为赝标量胶球候选者可能性的理论讨论^[186-190]。但是，淬火格点 QCD 研究预言赝标量胶球的质量大约在 2.4~2.6 GeV^[67-69]，这一结果也被动力学夸克的格点模拟确认^[112, 191-193]。这就引起了对 $\eta(1405)$ 作为胶球候选者的质疑，因为它的质量轻太多了。另一方面，关于 $\eta(1405)$ 作为胶球候选者的一个有力证据是观察到了三个味道单态赝标量介子 $\eta(1295)$ ， $\eta(1405)$ 和 $\eta(1475)$ ，这样根据夸克模型，它们其中之一是多余的。如果 $\eta(1405)$ 和 $\eta(1475)$ 实际上是同一个态^[194]，那么胶球就没有必要在这个质量区间内存在。一些混合模型研究也支持赝标量胶球应该有超过 2 GeV 的质量^[195-196]。

在此工作中，我们将研究同位旋单态赝标量介子和赝标量胶球在 $N_f = 2$ 的格点 QCD 中混合的可能性。这个同位旋单态赝标量介子被命名为 $\eta_{(2)}$ ，它是 $N_f = 3$ 情形下 SU(3) 味道单态介子（基本上就是 η' ）在 SU(2) 中的对应。我们生成了一个统计量很大的规范系综，组态在对应 π 介子质量 $m_\pi \approx 350$ MeV 的 $N_f = 2$ 简并的 u, d 夸克下取得，因此我们可以精确地确定 $\eta_{(2)}$ 的质量。 η' 质量（以及 η - η' 混合）已经在数个 $N_f = 2 + 1$ 的格点 QCD 研究中计算过了，他们的结果都在手征外推下与物理结果符合^[197-200]。文章 [201] 对 η 和 η' 的性质做了系统而全面的格点研究，包括质量、衰变常数、 η 和 η' 胶子型矩阵元都被高精度地确定。另外还有许多在 $N_f = 2$ 格点 QCD 上进行的对 η 质量的研究^[112, 202-204]。根据 Witten-Veneziano 机制（WV），在 $N_f = 2$ 的情形下 π 和 $\eta_{(2)}$ 质量有关系 $m_{\eta_{(2)}}^2 = m_\pi^2 + m_0^2$ ，这里 m_0^2 是拓扑诱导的相互作用引入的修正，这个值与 N_f 成正比。我们希望查看这一关系，并使用获得的 m_0^2 预言物理的 η' 质量，以此作为对 WV 机制的检验（可以在文章 [205] 中找到一个在淬火近似下以这种方式进行的开创性的工作）。之后，我们计算 $\eta_{(2)}$ 算符和胶球算符之间的关联函数，从中可以抽取混合角。这种研究策略与我们之前在 η_c -胶球的混合研究中使用的类似^[206]。作为一个探索性的研究，我们暂时将赝标量胶球视为一个稳定的粒子，并忽略它在轻夸克海中存在的共振性质。显然的，这一过程数值上涉及到 u, d 夸克湮灭图的计算，因此我们采用了蒸馏方法^[87]，一种可以对夸克场做规范不变涂摩并且估计全传播子（馏分传播子）的数值方法。考虑到我们已经有了价赝夸克的馏分传播子，我们也一并计算了 $\eta_{(2)}$ - η_c 的关联函数以探索它们的性质。

本章按照如下方式组织：在 3.2 节我们描述格点设置，算符构造和关联函数的公式；节给出了介子-胶球混合的理论公式，在这一节可以找到数据分析和结果；讨论和总结在节给出，关于 $\eta_{(2)}$ - η_c 关联函数的初步结果也在此展示。

3.2 数值细节

此研究采用的格点配置详见 2.1 节，不再赘述。

3.2.1 算符构造和蒸馏方法

这项工作的主要目标是研究赝标量胶球和赝标量 $q\bar{q}$ 介子可能的混合，因此必须要考虑夸克湮灭图。为了完成湮灭图的计算，我们采用了蒸馏方法^[87]（原理详见 1.5.2 小节），它给出了一种夸克场上的涂摩方案（Laplacian Heaviside 涂摩），并且给出了一种对涂摩的夸克场全传播子的计算策略，它们被蒸馏为了由空间方向 Laplace 算符 $-\nabla^2$ 引导的 Laplacian Heaviside 子空间上的馏分传播子。由于我们也计划研究 $\eta_{(2)}-\eta_c$ 关联函数，因此我们在这个巨大的系综中计算了 u, d 和 c 夸克对应的馏分传播子，相应的 Laplacian Heaviside 子空间是由 Laplace 算符 70 个最低的本征值对应的本征向量张成的。我们采用了文章 [68-69] 中的策略构造主要耦合到静止基态胶球的优化 Hermitian 算符 $\mathcal{O}_G(t) = \mathcal{O}_G^\dagger(t)$ ，这种构造基于不同类型的 Wilson 圈和规范链接涂摩策略。

对于同位旋单态 $\eta_{(2)}$ ，可以采用内插场算符的形式定义为

$$\mathcal{O}_\Gamma = \frac{1}{\sqrt{2}} [\bar{u}^{(s)} \Gamma u^{(s)} + \bar{d}^{(s)} \Gamma d^{(s)}], \quad (3-1)$$

其中 Γ 取最简单的 γ_5 或者 $\gamma_4\gamma_5$ ， $u^{(s)}, d^{(s)}$ 是经过了 Laplacian Heaviside 涂摩的 u, d 夸克场。因此算符相应的两点关联函数可以被表达为

$$C_{\Gamma\Gamma}(t) = \frac{1}{L_t} \sum_{t_0=0}^{L_t-1} \sum_{\vec{x}, \vec{y}} \langle \mathcal{O}_\Gamma(\vec{x}, t_0 + t) \mathcal{O}_\Gamma(\vec{y}, t_0) \rangle = C_\Gamma(t) + 2\mathcal{D}_\Gamma(t), \quad (3-2)$$

这里 C_Γ 和 $\mathcal{D}_\Gamma(t)$ 分别代表来自连通图和非连通图的贡献。我们再考虑以下的关联函数

$$\begin{aligned} C_{GG}(t) &= \frac{1}{L_t} \sum_{t_0=0}^{L_t-1} \langle \mathcal{O}_G(t_0 + t) \mathcal{O}_G(t_0) \rangle, \\ C_{G\Gamma}(t) &= \frac{1}{L_t} \sum_{t_0=0}^{L_t-1} \sum_{\vec{x}} \langle \mathcal{O}_G(t_0 + t) \mathcal{O}_\Gamma^\dagger(\vec{x}, t_0) \rangle, \\ C_{\Gamma G}(t) &= \frac{1}{L_t} \sum_{t_0=0}^{L_t-1} \sum_{\vec{x}} \langle \mathcal{O}_\Gamma(\vec{x}, t_0 + t) \mathcal{O}_G(t_0) \rangle = \mp C_{G\Gamma}(t), \\ C_{\Gamma\Gamma_c}(t) &= \frac{1}{L_t} \sum_{t_0=0}^{L_t-1} \sum_{\vec{x}, \vec{y}} \langle \mathcal{O}_\Gamma(\vec{x}, t_0 + t) \mathcal{O}_{\Gamma_c}^\dagger(\vec{y}, t_0) \rangle, \end{aligned} \quad (3-3)$$

其中 \mp 符号来自 \mathcal{O}_Γ 的 Hermiticity，当 $\Gamma = \gamma_5$ 时取负号， $\Gamma = \gamma_4\gamma_5$ 时取正号。算符 $\mathcal{O}_{\Gamma_c} = \bar{c}^{(s)} \Gamma_c c^{(s)}$ 且仍有 $\Gamma_c = \gamma_5, \gamma_4\gamma_5$ ，同样也有经过 Laplacian Heaviside 涂摩的粲夸克场 $c^{(s)}$ 。显然，除了 C_{GG} 以外的所有关联函数都由夸克湮灭图贡献，这可以方便地在蒸馏方法地框架下处理得到。

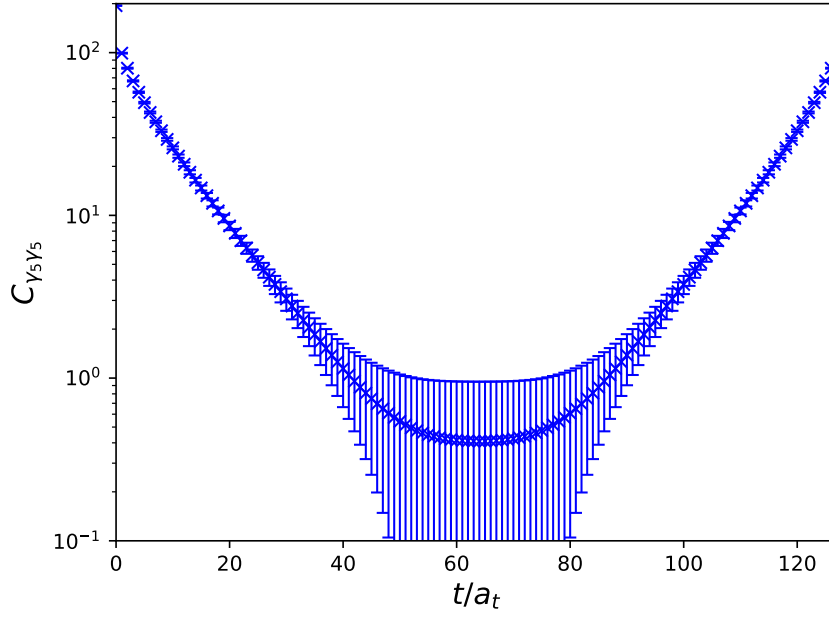


图 3-1 $\eta_{(2)}$ 在 $\Gamma = \gamma_5$ 时的关联函数

Figure 3-1 The correlation function of $\eta_{(2)}$ with $\Gamma = \gamma_5$. We can see the function contains a nonzero constant with a large error near $t = L_t/2$.

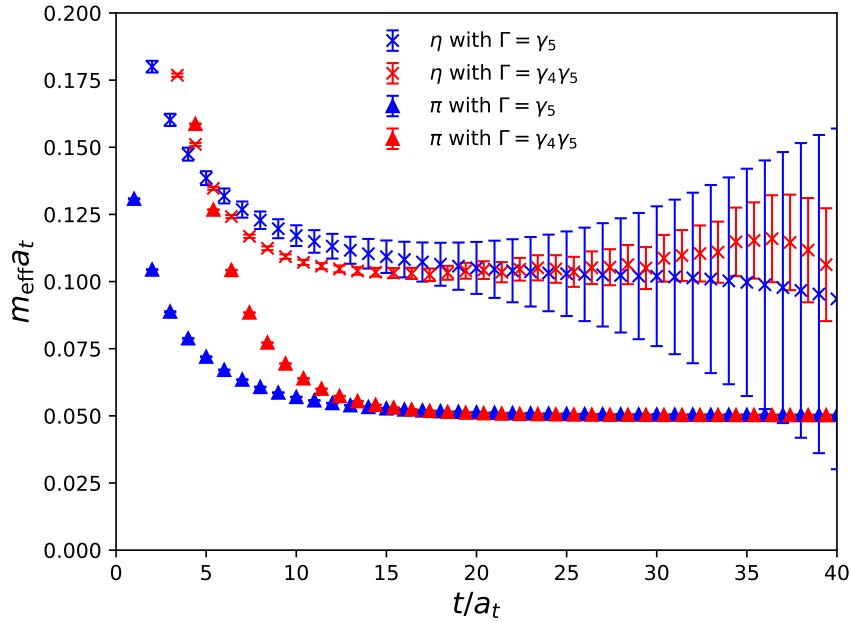


图 3-2 $\pi, \eta_{(2)}$ 在不同 Γ 时的有效质量

Figure 3-2 The effective masses of $\pi, \eta_{(2)}$ with different Γ insertions. For $\eta_{(2)}$, the signal-to-noise ratio looks better in the case $\Gamma = \gamma_4 \gamma_5$ because the corresponding correlation function doesn't contain a constant associated with the topology of QCD vacuum.

3.2.2 进一步标定 $\eta_{(2)}$ 质量

我们计算了两种 $\eta_{(2)}$ 的关联函数, $C_{\gamma_5\gamma_5}(t)$ 和 $C_{(\gamma_4\gamma_5)(\gamma_4\gamma_5)}(t)$ 。我们确实在 $C_{\gamma_5\gamma_5}(t)$ 中观察到了有限体积效应, 如图 3-1, 当 t 很大时两点关联函数看起来含有一个误差很大的常数项。有人认为这一常数项来自 QCD 真空的拓扑结构, 可以近似地表示为 $a^5(\chi_{\text{top}} + Q^2/V)/L_t$, 这里 a 是各向同性的格距, Q 是拓扑荷, V 是格点空间体积^[204, 207-208]。这可以从反常的轴矢流关系理解, 算符 \mathcal{O}_{γ_5} 有和拓扑荷密度算符直接的关联。有趣的是, $C_{(\gamma_4\gamma_5)(\gamma_4\gamma_5)}(t)$ 在 t 较大时有正常的趋于零的行为。通常, 这些关联函数与 t 的关系可以通过有效质量式

$$m_{\text{eff}}(t) = \ln \frac{C_{\Gamma\Gamma}(t)}{C_{\Gamma\Gamma}(t+1)}, \quad (3-4)$$

这里 Γ 可能是 γ_5 或者 $\gamma_4\gamma_5$ 。这是 1.4.2 小节提到的有效质量表达式 (1-114) 的一种在 t 不那么接近 $L_t/2$ 时的简化。图 3-2 展示了这些有效质量。得益于我们规范系综的巨大统计量, $\Gamma = \gamma_4\gamma_5$ 的情形从 $t \sim 10$ 开始有效质量基本开始形成平台, 并且在 $t \sim 20$ 的区间仍然保有较好的信噪比。通过对 $C_{\gamma_5\gamma_5}(t)$ 和 $C_{(\gamma_4\gamma_5)(\gamma_4\gamma_5)}(t)$ 进行联合的两质量项拟合, 我们得到了 $\eta_{(2)}$ 的质量

$$m_{\eta_{(2)}} = 714(6) \text{ MeV}, \quad (3-5)$$

此处误差通过刀切法重抽样估计。这个值看起来比之前的格点结果^[202-204] 轻了大约 10%, 但对于轻味道单态赝标量介子的 WV 机制^[181-182] 来说, 它也看起来更合理。根据 WV 机制, 味道单态赝标量介子的大质量与 QCD 真空的拓扑结构有着直接的关联。在 $N_f = 2$ 情形下, 在手征微扰论的领头阶, $m_{\eta_{(2)}}$ 有与 m_π 的关系

$$m_{\eta_{(2)}}^2 = m_\pi^2 + m_0^2, \quad (3-6)$$

此处参数 m_0^2 被定义为与拓扑磁化率 χ_{top} 和 π 衰变常数 F_π 的形式,

$$m_0^2 \approx \frac{4N_f}{f_\pi^2} \chi_{\text{top}}. \quad (3-7)$$

通常, χ_{top} 适用于纯规范场的情形, 预期与味道数 N_f 无关。使用数值 $m_\pi = 348.5(1.0) \text{ MeV}$ 和 $m_{\eta_{(2)}} = 714(6) \text{ MeV}$, 可以计算得到 $m_0^2 = 0.388(8) \text{ GeV}^2$ 。根据 $N_f = 2$ 手征微扰论的领头阶, 考虑手征微扰论常用的记号 $f_\pi = \sqrt{2}F_\pi$, F_π 关于 m_π 的依赖^[17, 209-210] 为

$$F_\pi = F \left[1 + x \left(\ln \frac{m_{\pi, \text{phys}}^2}{m_\pi^2} + \bar{l}_4 \right) + \mathcal{O}(x^2) \right], \quad (3-8)$$

$m_{\pi, \text{phys}} = 134.98 \text{ MeV}$, $x = \frac{m_\pi^2}{(4\pi F)^2}$, F 是手征极限下的 F_π 数值取 $86(1) \text{ MeV}$, 低能常数 $\bar{l}_4 = 4.40(28)$ 取 $N_f = 2$ 格点平均值^[17]。考虑这个规范系综上 $m_\pi =$

348.5(1.0) MeV,

$$\frac{F_\pi}{F_{\pi,\text{phys}}} = 1.17(1)^{+0.03}_{-0.02}, \quad (3-9)$$

第一个误差来源于 F 的误差，第二个误差来源于 \bar{l}_4 的不确定性。将以上数值代入 χ_{top} 的表达式，有 $\chi_{\text{top}}^{1/4} = 183(3)$ MeV，这一数值与唯象结果的 180 MeV 和格点数值的 185.3(5.6) MeV^[183] 都非常接近。在物理的 $N_f = 3$ 情形下，考虑物理的 π 介子质量，GMO 关系给出赝标介子八重态对应的单态部分质量应当是 $m_1^2 = (2m_K^2 + m_\pi^2)/3 \approx 0.170\text{GeV}^2$ 。将得到的拓扑磁化率代入，我们可以估计味道单态赝标量介子的质量为

$$m_{\eta_1}^2 = m_1^2 + \frac{12\chi_{\text{top}}}{f_{\pi,\text{phys}}^2} \approx 0.961 \text{ GeV}^2, \quad (3-10)$$

那么 $m_{\eta_1} \approx 0.981$ GeV，这一数值与实验值 $m_{\eta'} = 0.958$ GeV（基本由味道单态组成）相差不多。GMO 关系同时也给出 $m_{\eta_8}^2 = (4m_K^2 - m_\pi^2)/3 \approx 0.321 \text{ GeV}^2$ ， $m_{\eta_8} \approx 0.567$ GeV。这确认了 WV 机制对于 SU(2) 和 SU(3) 中味道单态的赝标量介子都工作得相当好。另一方面，这些结果也增强了我们在 2.5.1 小节中标度设置的合理性。

3.3 关于 $\eta_{(2)}$ -胶球混合

3.3.1 理论考虑

为了研究赝标量胶球和 $\eta_{(2)}$ 之间可能的混合，我们必须将关联函数式 (3-3) 参数化。我们采取如下的理论逻辑。正如一般的格点研究，算符 \mathcal{O}_X 和 \mathcal{O}_Y 的关联函数 $C_{XY}(t)$ 可以被参数化为

$$C_{XY} = \sum_{n \neq 0} \langle 0 | \mathcal{O}_X | n \rangle \langle n | \mathcal{O}_Y^\dagger | 0 \rangle [e^{-E_n t} \pm e^{-E_n(L-t)}], \quad (3-11)$$

\pm 符号指示 \mathcal{O}_X 和 \mathcal{O}_Y 的 Hermiticity 是否一致， $|n\rangle$ 是格点 Hamilton 算符 \hat{H} 的本征态，定义为 $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$ ， E_n 就是相应的本征能量。给定一个量子数， $|n\rangle$ 构成了一个归一化的正交完备集合，有 $\sum_n |n\rangle \langle n| = 1$ 和 $\langle m | n \rangle = \delta_{m,n}$ 。这里 \hat{H} 没有具体的形式，因此实际上不能从关联函数中得到这些本征态确切的粒子配置。就 $N_f = 2$ 的 QCD 理论中的味道单态赝标量道而言，如果理论上存在的话，每个 $|n\rangle$ 都应该是裸 $\eta_{(2)}$ 态和裸胶球态的特定混合（这里我们暂时忽略多强子态），它们可以构成一个自由的 Hamilton 算符 \hat{H}_0 的本征态集合 $\{|\alpha_n\rangle, n = 1, 2, \dots\}$ 。考虑到我们是在一个 u, d 夸克么正的格点框架下工作，这个态集合应该是一个归一化的正交完备集合。现在我们引入含有相互作用的 Hamilton 算符 \hat{H}_I 来说明可能的混合的动力学，这样 $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_I$ 的本征态 $|n\rangle$ 可以展开为

$$|n\rangle = \sum_m c_{nm} |\alpha_m\rangle, \quad (3-12)$$

有 $\sum_m |c_{nm}|^2 = 1$ 。这个意义下，可以说 $|n\rangle$ 是一个 $|\alpha_m\rangle$ 组成的混合态，相应的组分分数为 $|c_{nm}|^2$ 。更进一步，若 \hat{H}_I 相对于 \hat{H}_0 是小量，可以考虑最低阶的微扰，

$$|n\rangle = |\alpha_n\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle \alpha_m | \hat{H}_I | \alpha_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\alpha_m\rangle, \quad (3-13)$$

$$E_n = E_n^{(0)} + \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \alpha_m | \hat{H}_I | \alpha_n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}, \quad (3-14)$$

$E_n^{(n)}$ 是 $|\alpha_n\rangle$ 的本征能量，从低到高排列。

实验上已经观察到的味道单态赝标量介子有 $\eta, \eta', \eta(1295), \eta(1405), \eta(1475)$ 等等^[1]，它们被认为是不同径向量子数的 $q\bar{q}$ SU(3) 九重态的同位旋 $I = 0$ 成员。至于此研究中 SU(2) 的情形，每个同位旋四重态都只有一个同位旋单态，介子谱被极大地简化了。由于涂摩的夸克场压低了 $\eta_{(2)}$ 两点关联函数中激发态的贡献，作为简单的近似，我们可以截断 $\eta_{(2)}$ 谱到两个态 $\eta_{(2)}$ 和 $\eta_{(2)}^*$ ， $\eta_{(2)}^*$ 也代表所有 $\eta_{(2)}$ 激发态的贡献。另一方面，淬火格点 QCD 预言了最轻的赝标量胶球质量大约在 $2.4 \sim 2.6$ GeV。这一结果看起来被关联函数 $C_{GG}(t)$ 的结果确认了，相应的优化算符 \mathcal{O}_G 被期望最大地耦合到基态。因此我们同样考虑两个赝标量胶球态 $|G\rangle$ 和 $|G^*\rangle$ ， $|G^*\rangle$ 同样代表所有激发态的贡献。最终，我们得到了以下的基

$$|\alpha_i\rangle = |\eta_{(2)}\rangle, |\eta_{(2)}^*\rangle, \dots, |G\rangle, |G^*\rangle, \dots \quad (3-15)$$

使用这些基，自由的 Hamilton 算符可以定义为 $\hat{H}_0 = \text{diag}\{m_{\eta_{(2)}}, m_{\eta_{(2)}^*}, m_G, m_{G^*}\}$ ，是一个元素数值为相应基质量的对角矩阵，按照增序排列。理论上， $|\eta_{(2)}\rangle$ 和 $|\eta_{(2)}^*\rangle$ 是正交的， $|G\rangle$ 和 $|G^*\rangle$ 也同样如此。这样，相互作用 Hamilton 算符 \hat{H}_I 可以写成

$$\hat{H}_I = \begin{pmatrix} 0 & 0 & x_1 & y_1 \\ 0 & 0 & x_2 & y_2 \\ x_1 & x_2 & 0 & 0 \\ y_1 & y_2 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3-16)$$

x_1, x_2, y_1, y_2 有时也叫做混合能量。相应的，我们有如下对态 $|n\rangle$ 的展开

$$\begin{aligned} |1\rangle &\approx |\eta_{(2)}\rangle + \frac{x_1}{m_{\eta_{(2)}} - m_G} |G\rangle + \frac{y_1}{m_{\eta_{(2)}} - m_{G^*}} |G^*\rangle, \\ |2\rangle &\approx |\eta_{(2)}^*\rangle + \frac{x_2}{m_{\eta_{(2)}^*} - m_G} |G\rangle + \frac{y_2}{m_{\eta_{(2)}^*} - m_{G^*}} |G^*\rangle, \\ |3\rangle &\approx |G\rangle + \frac{x_1}{m_G - m_{\eta_{(2)}}} |\eta_{(2)}\rangle + \frac{x_2}{m_G - m_{\eta_{(2)}^*}} |\eta_{(2)}^*\rangle, \\ |4\rangle &\approx |G^*\rangle + \frac{y_1}{m_{G^*} - m_{\eta_{(2)}}} |\eta_{(2)}\rangle + \frac{y_2}{m_{G^*} - m_{\eta_{(2)}^*}} |\eta_{(2)}^*\rangle. \end{aligned} \quad (3-17)$$

3.3.2 $\Gamma = \gamma_5$ 情形

现在我们可以通过关联函数 $C_{G\gamma_5}(t)$ 研究 $\eta_{(2)}$ -胶球混合可能性。首先我们观察图 3-3 中 $C_{G\gamma_5}(t)$ 的形状，有以下结论：

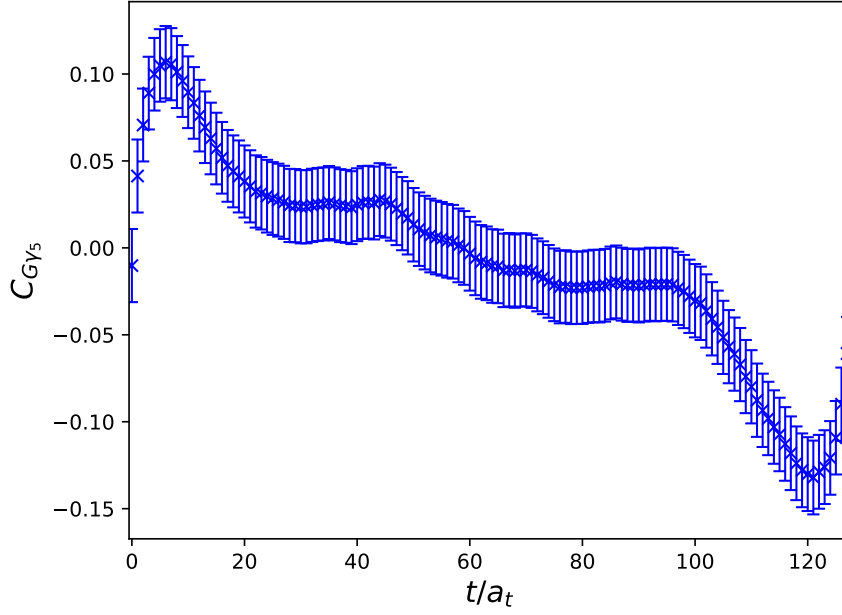


图 3-3 $\Gamma = \gamma_5$ 时 $\eta_{(2)}$ -胶球的关联函数 $C_{G\gamma_5}$

Figure 3-3 The correlation function of $\eta_{(2)}$ -G with $\Gamma = \gamma_5$, called $C_{G\gamma_5}$. The value of this correlator tends to zero at $t = 0$ within errors, and the error seems to be a constant independent of t . The correlator approaches a positive(negative) constant when $t < \frac{L_t}{2}$ ($t > \frac{L_t}{2}$) which might be due to the contribution from topology.

(1) $C_{G\gamma_5}(t)$ 是关于时间 $t = L_t/2$ 反对称的，在 $t = 0$ 时近似为 0。这是因为 \mathcal{O}_G 算符被构造为 Hermitian，而 \mathcal{O}_{γ_5} 为反 Hermitian。这种不一致导致整个关联函数是关于 t 的奇函数，在 $t = 0$ 时，显然有关联函数为 0。

(2) $C_{G\gamma_5}(t)$ 在 $t < L_t/2$ ($t > L_t/2$) 时趋近于一个正（负）的常数。这可能是因为类似于 3.2.2 小节提到的 $C_{\gamma_5\gamma_5}(t)$ 中来自于拓扑结构的贡献。考虑到 $C_{G\gamma_5}(t)$ 是奇函数，那么这一贡献也是奇函数。

(3) 尽管的数值 $C_{G\gamma_5}(t)$ 随着 t 变化相当平滑，但是它的误差几乎是一个相当大的常数。

为了寻找一种能够描述这些性质的函数形式，我们采用了近似

$$\mathcal{O}_G^\dagger|0\rangle \approx \sum_{i \neq 0} Z_{G_i} |G_i\rangle, \quad \mathcal{O}_{\gamma_5}^\dagger|0\rangle \approx \sum_{i \neq 0} Z_{\gamma_5, i} |\eta_{(2), i}\rangle, \quad (3-18)$$

这还假设了 $\langle 0 | \mathcal{O}_G | \eta_{(2), i} \rangle \approx 0$ 和 $\langle 0 | \mathcal{O}_{\gamma_5} | G_i \rangle \approx 0$ ，与 η - η' 混合研究中类似^[197-198]。

因此，我们有以下 \mathcal{O}_G 和 \mathcal{O}_{γ_5} 的耦合矩阵元

$$\begin{aligned}\langle 0|\mathcal{O}_G|1\rangle &= \frac{x_1 Z_G}{m_{\eta_{(2)}} - m_G} + \frac{y_1 Z_{G^*}}{m_{\eta_{(2)}}^* - m_{G^*}}, \\ \langle 0|\mathcal{O}_G|2\rangle &= \frac{x_2 Z_G}{m_{\eta_{(2)}}^* - m_G} + \frac{y_2 Z_{G^*}}{m_{\eta_{(2)}}^* - m_{G^*}}, \\ \langle 0|\mathcal{O}_G|3\rangle &= Z_G, \\ \langle 0|\mathcal{O}_G|4\rangle &= Z_{G^*},\end{aligned}\tag{3-19}$$

以及

$$\begin{aligned}\langle 0|\mathcal{O}_{\gamma_5}|1\rangle &= Z_{\gamma_5,1}, \\ \langle 0|\mathcal{O}_{\gamma_5}|2\rangle &= Z_{\gamma_5,2}, \\ \langle 0|\mathcal{O}_{\gamma_5}|3\rangle &= -\frac{x_1 Z_{\gamma_5,1}}{m_{\eta_{(2)}} - m_G} - \frac{x_2 Z_{\gamma_5,2}}{m_{\eta_{(2)}}^* - m_G}, \\ \langle 0|\mathcal{O}_{\gamma_5}|4\rangle &= -\frac{y_1 Z_{\gamma_5,1}}{m_{\eta_{(2)}} - m_{G^*}} - \frac{y_2 Z_{\gamma_5,2}}{m_{\eta_{(2)}}^* - m_{G^*}}.\end{aligned}\tag{3-20}$$

作为一个探索性的研究，也为了简化之后的数据分析，我们暂时忽略了 $\eta_{(2)}^*$ 的贡献，这意味着使用近似 $\mathcal{O}_{\gamma_5}^\dagger|0\rangle \approx Z_{\gamma_5,1}|\eta_{(2)}\rangle$ 。将式 (3-17,3-19,3-20) 代入参数化形式 (3-11)，我们得到了 $C_{G\gamma_5}(t)$ 的近似表达式

$$\begin{aligned}C_{G\gamma_5}(t) &\approx Z_G Z_{\gamma_5,1} \frac{x_1}{m_{\eta_{(2)}} - m_G} (e^{-m_1 t} - e^{-m_3 t}) \\ &\quad + Z_{G^*} Z_{\gamma_5,1} \frac{y_1}{m_{\eta_{(2)}} - m_{G^*}} (e^{-m_1 t} - e^{-m_4 t}) \\ &\quad - t \rightarrow (L_t - t) \text{ terms}.\end{aligned}\tag{3-21}$$

这一形式保证了 $C_{G\gamma_5}(0) = 0$ ，与我们的观察一致。

为了试图理解 $C_{G\gamma_5}(t)$ 中近乎常数的误差，我们考虑它的方差^[211]

$$\delta^2 C_{G\gamma_5}(t) \equiv \langle \mathcal{O}_G^2(t) \mathcal{O}_{\gamma_5}^2(0) \rangle - C_{G\gamma_5}^2(t).\tag{3-22}$$

第一项可以视作算符 \mathcal{O}_G^2 和 $\mathcal{O}_{\gamma_5}^2$ 的关联函数，两者都有真空量子数 0^{++} （连续极限下），那么存在非零的真空期望值 $\langle \mathcal{O}_{\gamma_5}^2 \rangle \neq 0$ 和 $\langle \mathcal{O}_G^2 \rangle \neq 0$ ，定义消去真空期望值的算符 $\bar{\mathcal{O}} \equiv \mathcal{O} - \langle \mathcal{O} \rangle$ ，

$$\delta^2 C_{G\gamma_5}(t) = \langle \bar{\mathcal{O}}_G^2(t) \bar{\mathcal{O}}_{\gamma_5}^2(0) \rangle - C_{G\gamma_5}^2(t) + \langle \mathcal{O}_G^2 \rangle \langle \mathcal{O}_{\gamma_5}^2 \rangle.\tag{3-23}$$

近乎常数的误差意味着常数项 $\langle \mathcal{O}_G^2 \rangle \langle \mathcal{O}_{\gamma_5}^2 \rangle$ 主要贡献了 $C_{G\gamma_5}(t)$ 的方差。这与文章 [211] 中关联函数的误差主要由能量最低的态贡献的观点一致，因为显然有真空态能量 $E_{\text{vac}} = 0$ 。这促使我们考虑 $C_{G\gamma_5}(t)$ 的时间导数，有估计

$$\partial_t C_{G\gamma_5}(t) = \frac{1}{2} [C_{G\gamma_5}(t+1) - C_{G\gamma_5}(t-1)],\tag{3-24}$$

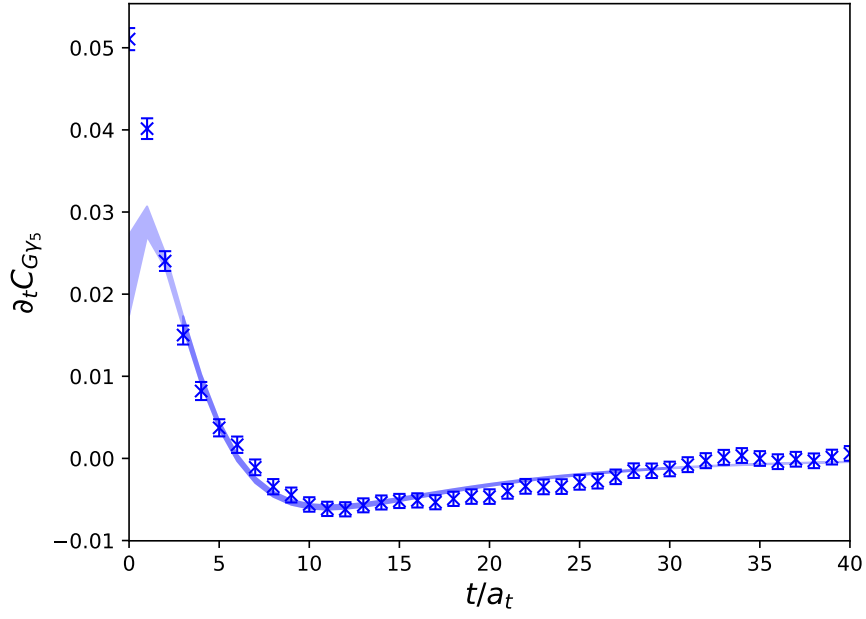


图 3-4 $C_{G\gamma_5}$ 的时间偏导数

Figure 3-4 The temporal derivative of $C_{G\gamma_5}$ defined by Eq. (3-24). The data points are lattice results and the shaded band illustrates the fitting results using Eq. (3-21). The signal to noise ratio of $\partial_t C_{G\gamma_5}$ is much better than that of $C_{G\gamma_5}$ in Fig. 3-3.

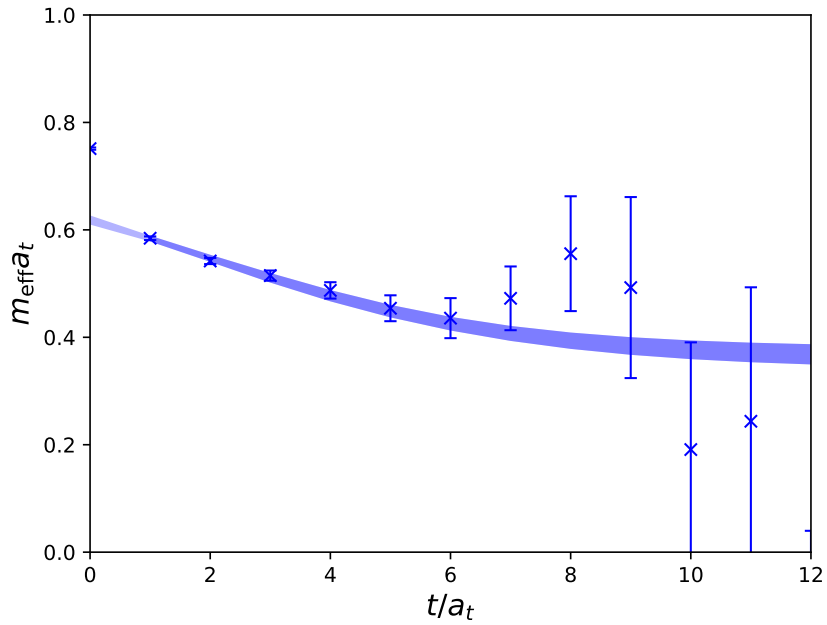


图 3-5 赝标量胶球的有效质量

Figure 3-5 The effective mass of the pseudoscalar glueball. The shaded band illustrates the fitting results using Eq. (3-25) with two mass terms.

表 3-1 从系综上计算的关联函数中拟合得到的基态质量和混合角

Table 3-1 Ground state mass and mixing angle fitted from operators with $\Gamma = \gamma_5$ and $\Gamma = \gamma_4\gamma_5$ on the ensemble. Values of $m_{\eta_{(2)}}$ are the same in both cases because the value is derived from a combined fit to $C_{\gamma_5\gamma_5}$ and $C_{(\gamma_4\gamma_5)(\gamma_4\gamma_5)}$. χ^2 are obtained from the fitting results of $C_{G\Gamma}$.

Γ	$[t_l, t_h]_\Gamma$	$[t_l, t_h]_{GG}$	$[t_l, t_h]_{G\Gamma}$	$\chi^2/\text{d.o.f.}$
γ_5	[9, 30]	[1, 14]	[3, 30]	0.96
$\gamma_4\gamma_5$	[5, 30]	[1, 14]	[0, 30]	0.15

Γ	$m_{\eta_{(2)}} a_t$	$m_G a_t$	$ x_1 a_t$	$ \theta $
γ_5	0.10358(84)	0.3607(75)	0.0155(22)	3.46(46)°
$\gamma_4\gamma_5$	0.10358(84)	0.3607(75)	0.0112(55)	2.5(1.2)°

这样常数项和常数方差项都会被消除。图 3-4 展示了 $\partial_t C_{G\gamma_5}(t)$ 的图像，可以看到偏导数在 t 较大时趋于 0，并且相对误差远比原函数小。

为了从关联函数 (3-21) 中抽取混合能量 x_1 和 y_1 ，必须先获取参数 $m_1, m_3, m_4, m_{\eta_{(2)}}, m_G, m_{G^*}, Z_G, Z_{G^*}$ 和 $Z_{\gamma_5,1}$ 的数值。基于式 (3-18)，可以从关联函数 $C_{GG}(t)$ 和 $C_{\gamma_5\gamma_5}(t)$ 中抽取部分参数，

$$C_{GG}(t) = \sum_i Z_{G_i}^2 \left[e^{-m_{G_i} t} + e^{-m_{G_i} (L-t)} \right] \quad (3-25)$$

$$C_{\gamma_5\gamma_5}(t) = \sum_i Z_{\gamma_5,i}^2 \left[e^{-m_{\eta_{(2)},i} t} + e^{-m_{\eta_{(2)},i} (L-t)} \right], \quad (3-26)$$

那么 G_1, G_2 对应于 G, G^* ， $\eta_{(2),1}$ 对应于 $\eta_{(2)}$ 。尽管我们采用了基于 24 个算符生成的优化胶球算符 \mathcal{O}_G ，但从结果上看 $C_{GG}(t)$ 中还是有显著的激发态贡献，因此 G^* 态确实需要被考虑。为了说明这一点，我们在图 3-5 画出了 $C_{GG}(t)$ 对应的有效质量，可以看到基态胶球 G 并没有在信噪比不可接受之前占据主要贡献。如同之前提及的， G^* 并没有实际上的物理含义，而是作为一种近似手段被添加的。

考虑到混合效应应该并不大（我们最终的结果确认了这一点），我们假设 $m_1 \approx m_{\eta_{(2)}}$ ， $m_3 \approx m_G$ ， $m_4 \approx m_{G^*}$ 。在数据分析过程中，我们首先将 $N_{\text{cfg}} = 6991$ 个组态上的测量分为 139 组，每组 50 个测量，再通过分组的刀切法重抽样估计最终结果的误差。首先，我们从 $C_{GG}(t)$ ， $C_{\gamma_5\gamma_5}(t)$ 和 $C_{(\gamma_4\gamma_5)(\gamma_4\gamma_5)}$ 中抽取 $m_{\eta_{(2)}}$ ， m_G ， m_{G^*} ， Z_G ， Z_{G^*} ， $Z_{\gamma_5,1}$ 和 $Z_{\gamma_4\gamma_5,1}$ ，拟合函数形式时使用的时间区间分别为 $[t_l, t_h]_{GG} = [1, 14]$ ， $[t_l, t_h]_{\gamma_5} = [9, 30]$ 和 $[t_l, t_h]_{\gamma_4\gamma_5} = [5, 30]$ 。之后我们将这些数值代入 $\partial_t C_{G\gamma_5}(t)$ 的形式中并确定 x_1 参数。最终， $m_{\eta_{(2)}}$ ， m_G 和 $|x_1|$ 的数值和刀切法估计的误差为

$$m_{\eta_{(2)}} a_t = 0.10358(84), m_G a_t = 0.3607(75), |x_1| a_t = 0.0155(22). \quad (3-27)$$

注意我们给出的混合能量是绝对值的形式 $|x_1|$ ，这是因为通过两点函数只能抽取 Z_G^2 和 $Z_{\gamma_5,1}^2$ 的数值，那么实际上无法确定式 (3-21) 形式中 $Z_G Z_{\gamma_5,1}$ 的正负号。拟合过程使用的参数和结果在表 3-1 中列出。可以看到对 $\partial_t C_{G\gamma_5}(t)$ 的拟合相当好，这反映在了 $\chi/\text{d.o.f.} = 0.96$ ，相应的图像也在图 3-4 中以带状阴影给出。同时，

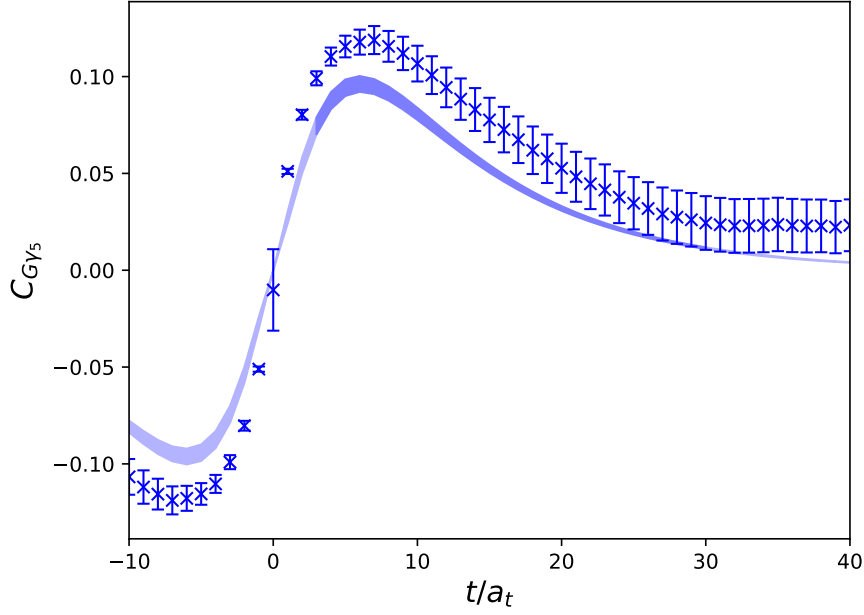


图 3-6 利用 t 奇函数性质折叠的 $C_{G\gamma_5}$

Figure 3-6 $C_{G\gamma_5}$, and used $(L_t/2)$ -odd property to fold the data for every gauge configuration. The blue band shows the fitted results. The band doesn't perfectly match the data point because we just fitted temporal derivative $\partial_t C_{G\gamma_5}$ instead of correlation function $C_{G\gamma_5}$, so we dropped some constant in the fitting result. The $(L_t/2)$ -odd property makes the constant negative in $-t$ direction. The x-axis is shifted by 10 to show the near-zero behavior.

为了利用函数关于 $t = L_t/2$ 是奇函数的性质（那么 t 偏导数就是关于 $t = L_t/2$ 的偶函数），在实际的拟合过程中我们折叠了 $t < L_t/2$ 和 $t > L_t/2$ 的贡献，绘制在图 3-6 中，可以看到在 $t = 0$ 附近的数据点误差极大的降低了。将拟合 $\partial_t C_{G\gamma_5}(t)$ 得到的参数代回 $C_{G\gamma_5}(t)$ 中，以带状阴影形式同时绘制在图中。拟合的结果形状与数据点符合，但是大致缺少了一个常数项的贡献，这一贡献在 $t < L_t/2$ 和 $t > L_t/2$ 区间反号。

考虑到 $|x_1|$ 的数值远小于 $m_G - m_{\eta_{(2)}}$ ，在最低阶的微扰论，我们可以估计 $\eta_{(2)}$ 与基态胶球混合的混合角

$$|\theta| \approx \sin |\theta| \approx \frac{|x_1|}{m_G - m_{\eta_{(2)}}} = 3.46(46)^\circ. \quad (3-28)$$

3.3.3 $\Gamma = \gamma_4\gamma_5$ 情形

作为一种交叉检验，我们同样对 $\Gamma = \gamma_4\gamma_5$ 构造的 $\eta_{(2)}$ 内插场算符进行了类似的计算。相应的关联函数 $C_{G(\gamma_4\gamma_5)}(t)$ 和 $C_{(\gamma_4\gamma_5)(\gamma_4\gamma_5)}(t)$ 已经在式 (3-3) 中定义。与 $\Gamma = \gamma_5$ 情形不同，关联函数 $C_{G(\gamma_4\gamma_5)}(t)$ 在 $t = 0$ 时并不趋于 0。这与赝标量粲偶素和赝标量胶球混合研究中看到的类似，那么采用类似的逻辑，QCD $U_A(1)$ 反常可能在此发挥了重要作用。显然，算符 $\mathcal{O}_{\gamma_4\gamma_5}$ 与同位旋单态轴矢流 $j_\mu^5(x) =$

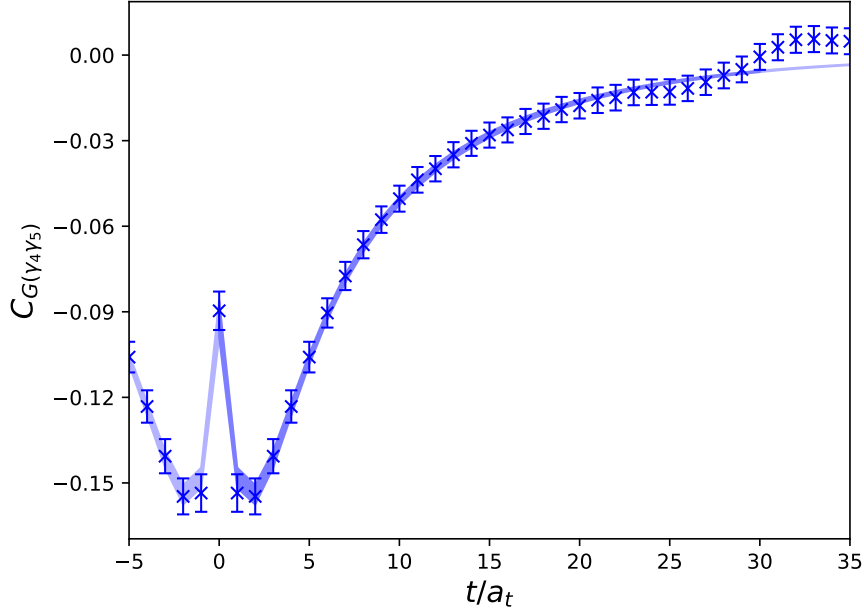


图 3-7 $\Gamma = \gamma_4\gamma_5$ 时 $\eta_{(2)}$ -胶球的关联函数 $C_{G(\gamma_4\gamma_5)}$

Figure 3-7 The correlation function of $\eta_{(2)}$ -G with $\Gamma = \gamma_4\gamma_5$, called $C_{G(\gamma_4\gamma_5)}$. The shaded band illustrates the fitting results using Eq. (3-32). The fit window starts from $t = 0$ in order to match the near-zero behavior of the correlator. The x-axis is shifted by 5 to show the near-zero behavior.

$\frac{1}{\sqrt{2}} [\bar{u}(x)\gamma_\mu\gamma_5 u(x) + \bar{d}(x)\gamma_\mu\gamma_5 d(x)]$, 有反常轴矢流关系

$$\partial_\mu j_\mu^5(x) = 2m_q j^5(x) + \sqrt{2}q(x), \quad (3-29)$$

其中 $j^5(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\bar{u}(x)\gamma_5 u(x) + \bar{d}(x)\gamma_5 d(x)]$ 为赝标量密度, 第二项是来自 $U_A(1)$ 反常的项, 有 $q(x) = \frac{g^2}{32\pi^2} \epsilon^{\alpha\beta\rho\sigma} G_{\alpha\beta}^a G_{\rho\sigma}^a$, g 为强耦合常数, $G_{\alpha\beta}$ 为颜色场强张量. j^5 与 \mathcal{O}_{γ_5} 有相同的结构, 根据式 (3-18) 的假设,

$$m_{G_i}^2 f_{G_i} = \langle 0 | \partial_\mu j_\mu^5(x) | G_i \rangle \approx \sqrt{2} \langle 0 | q(x) | G_i \rangle. \quad (3-30)$$

这里 f_{G_i} 为赝标量胶球 G_i 的衰变常数。据此, 我们有

$$\langle 0 | j_4^5(0) | G_i(\vec{p} = 0) \rangle \approx \frac{\sqrt{2}}{m_{G_i}} \langle 0 | q(0) | G_i(\vec{p} = 0) \rangle. \quad (3-31)$$

之前的格点研究证明了确实可以使用 $q(x)$ 算符得到赝标量态^[69, 191], 因此有非零的 $\langle 0 | q(0) | G_i \rangle$, 从而引导了非零的 $\langle 0 | \mathcal{O}_{\gamma_4\gamma_5} | G_i \rangle$ 。仍然采用近似 $\mathcal{O}_G | 0 \rangle = \sum_{i \neq 0} Z_{G_i} | G_i \rangle$,

有参数化

$$\begin{aligned}
 C_{G(\gamma_4\gamma_5)}(t) \approx & A e^{-m_3 t} \\
 & + Z_G Z_{\gamma_4\gamma_5,1} \frac{x_1}{m_{\eta_{(2)}} - m_G} (e^{-m_1 t} - e^{-m_3 t}) \\
 & + Z_{G^*} Z_{\gamma_4\gamma_5,1} \frac{y_1}{m_{\eta_{(2)}} - m_{G^*}} (e^{-m_1 t} - e^{-m_4 t}) \\
 & + (t \rightarrow (L_t - t) \text{ terms}),
 \end{aligned} \tag{3-32}$$

与 $C_{G\gamma_5}(t)$ 的参数化形式 (3-21) 相比, 关于 $t = L_t/2$ 是偶函数, 并且多了一个来自于非零 $\langle 0|q(0)| \rangle$ 的幂次项 $A e^{-m_3 t}$ 。使用 $C_{(\gamma_4\gamma_5)(\gamma_4\gamma_5)}(t)$ 的参数化形式

$$C_{(\gamma_4\gamma_5)(\gamma_4\gamma_5)}(t) = \sum_i Z_{\gamma_4\gamma_5,i}^2 \left[e^{-m_{\eta_{(2)},i} t} + e^{-m_{\eta_{(2)},i} (L_t - t)} \right], \tag{3-33}$$

再采用类似的刀切法重抽样分析数据, 得到了相应的混合能量 $|x_1|a_t = 0.0112(55)$ 和混合角 $|\theta| = 2.5(1.2)^\circ$, 这与 $\Gamma = \gamma_5$ 情形中得到的结果在误差范围内符合, 但是有着大得多的误差。表 3-1 中同样给出了相应的拟合参数和结果。图 3-7 中绘制了相应的关联函数和拟合结果, 可以看到上述的函数形式将数据点拟合的非常好。在这一规范系综上, 这两种情形下的结果是自洽的。

3.4 关于 $\eta_{(2)}$ - η 关联函数

我们已经计算了轻夸克和价粲夸克的馏分传播子, 因此也计算了 η_c 与 $\eta_{(2)}$ 算符的关联函数 C_{Γ_c} , 这是一种仅仅由湮灭图贡献的过程, 内差场算符中的 Γ 可以分别取 γ_5 或 $\gamma_4\gamma_5$ 。这些关联函数的信噪比都相当好, 且相应的有效质量绘制在图 3-8 中, 水平的灰色线是前文中计算的 $\eta_{(2)}$ 质量 $m_{\eta_{(2)}} a_t$ 。尽管在小 t 时行为不尽相同, 但是这些有效质量在大 t 时都趋于 $m_{\eta_{(2)}}$ 。由于 $\eta_{(2)}$ 和 η_c 激发态的影响, 我们没有办法利用上文中的近似获得较好的拟合形式, 在讨论这些关联函数时或许需要优化算符才能获得更好的结果。这是未来探索的一个方向。

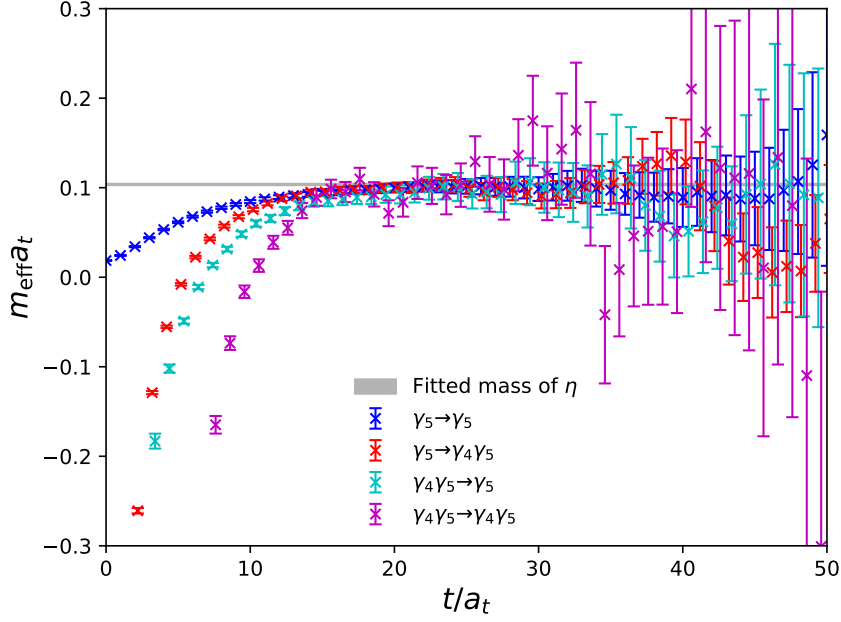

 图 3-8 $C_{\Gamma\Gamma_c}$ 在不同 Γ, Γ_c 的有效质量

Figure 3-8 Effective mass functions of $C_{\Gamma\Gamma_c}$. Different colors indicate different source Γ_c and sink Γ insertions. The grey band shows the fitted result of $m_{\eta_{(2)}} a_t$ with error, and we can see all four functions have plateaus near $m_{\eta_{(2)}} a_t$ at large t .

3.5 小结

我们在一个 $L_s^3 \times L_t = 16^3 \times 128$ 的各向异性为 $\xi = a_s/a_t \approx 5.3$ 的格点上生成了一个巨大的规范系统，含有 $N_f = 2$ 简并的 u, d 夸克。基于不同的重轻矢量和赝标量介子质量平方差与夸克质量并不敏感的实验发现，我们提出了一种新的标度设置方案，用以估计时间方向的格距 a_t 。实践中，我们采用 $m_V^2 - m_{PS}^2 = 0.568(8) \text{ GeV}^2$ ，这是对组分夸克为 $n\bar{n}$, $s\bar{n}$, $s\bar{s}$, $c\bar{n}$ 和 $c\bar{s}$ 的介子相应量的最小二乘拟合（ n 指代 u, d 夸克），得到 u, d 夸克质量参数对应的 π 介子质量为 $m_\pi \approx 350 \text{ MeV}$ ，这种标度设置方案能够给出合理的物理数值。我们通过蒸馏方法计算了 u, d 夸克和价 c 夸克的馏分传播子，相应的夸克湮灭图可以被高效地计算。

我们计算了同位旋单态赝标量介子 $\eta_{(2)}$ 的质量 $m_{\eta_{(2)}} = 714(6)(16) \text{ MeV}$ ，后一括号中的误差是 2.5.1 小节中估计格距时引入的。通过 Witten-Veneziano 关系，这一质量可以推广到 SU(3) 味道单态介子质量 $m_{\eta_1} \approx 958 \text{ MeV}$ ，这与实验上的 η' 质量 $m_{\eta'} = 958 \text{ MeV}$ 符合的较好（考虑 η - η' 混合）。

这是首次在格点上进行 $\eta_{(2)}$ 和胶球的混合的研究。从胶球和 $\eta_{(2)}$ 算符的关联函数出发，可以得到混合能量和混合角绝对值分别为 $|x_1| = 107(15)(2) \text{ MeV}$ 和 $|\theta| = 3.46(46)^\circ$ ，相应的赝标量胶球基态质量 $m_G \approx 2.5 \text{ GeV}$ 。混合非常微弱，因此在研究 $\eta_{(2)}$ 的性质时，可以忽略混合效应（相应于物理的 $N_f = 3$ 情形中同样

如此)。

总的来说，我们发现味道单态赝标量介子（在我们的格点配置中是 $\eta_{(2)}$ ）和赝标量胶球之间几乎没有混合。由于 QCD $U_A(1)$ 反常，QCD 真空的拓扑结构在 η 质量来源中有重要作用。这与一般的理论考虑相符^[212]。

最后我们简单查看了 $\eta_{(2)}$ - η_c 的两点关联函数和有效质量，但是由于各种激发态的贡献我们暂时无法对理论做足够的近似得到较好的参数化形式，需要进一步的探索。

第4章 $N_f = 2$ 格点 QCD 中 J/ψ 辐射衰变到 $\eta_{(2)}$ 的宽度

J/ψ 辐射衰变是研究轻强子物理的重要实验场所。 J/ψ 辐射衰变中轻强子的产生主要通过 J/ψ 发射一个光子后湮灭到数个（至少 2 个）胶子，末态胶子再强子化到数个轻强子的过程发生。 J/ψ 辐射衰变过程到轻强子有两个重要特征，其一是末态强子（系统）的同位旋为 $I = 0$ （通过胶子产生），这特别适合研究同位旋单态的强子的性质；另外，电磁相互作用的 C 宇称守恒要求末态强子（系统）的 C 宇称为正，这也对末态强子系统给出很强的限制。特别重要的是，如果胶球——纯粹由胶子构成的强子束缚态——存在，则 J/ψ 辐射衰变被公认为寻找并确定胶球态的重要场所之一，因为 J/ψ 辐射衰变是富含胶子的过程，而且朴素的 α_s 数幂律预期胶球的在该过程的产率会大于普通 $q\bar{q}$ 介子的产率，可能有利于胶球而非传统的轻 $q\bar{q}$ 介子的产生。北京正负电子对撞机和北京谱仪实验 (BEPCII/BESIII) 目前积累了 10^{10} 个 J/ψ 事例的数据样本^[213]，这是目前国际上最大的 J/ψ 事例样本，人们普遍预期基于该样本，BESIII 实验极有可能对胶球的存在与否给出确定的结论。

但是，要在实验上确定胶球态，需要关于胶球性质可靠的理论判据。对于胶球在 J/ψ 辐射衰变中的产生而言，则需要知道胶球在该过程的产率。此外，对于特定 J^{PC} 量子数的胶球，也存在相同量子数的普通 $q\bar{q}$ ，因此知道这些介子在 J/ψ 辐射衰变中的产率是十分必要的：如果胶球和普通 $q\bar{q}$ 介子的产率有明显的不同，则可以作为特异性的判据来判断胶球态。此前已有格点 QCD 研究在淬火近似下对标量胶球、张量胶球和赝标量胶球在 J/ψ 辐射衰变中的产率给出了预言^[214-216]，其中关于对标量胶球的产率的预言和实验上观察到的 $f_0(1710)$ 的产率基本一致，但比 $f_0(1500)$ 的产率大大约一个量级，这在一定程度上支持 $f_0(1710)$ 是胶球态或具有很大的胶球成分，但如果理论上知道标量 $q\bar{q}$ 介子的产率，则能提供更完整的判据。

本论文的重要研究内容之一就是探索利用格点 QCD 计算轻 $q\bar{q}$ 介子的 J/ψ 辐射衰变中的产率的可行性，并对特定的轻强子进行实际物理研究。这样的研究必须在具有动力学夸克的组态上进行，从而保证味道单态轻强子传播子理论上的严格性（完整的味道单态轻强子的传播子包括夸克连通图以及有动力学夸克圈构成的非联通图的贡献），为此我们自主产生了大统计量的、包含 $N_f = 2$ 味动力学轻夸克的规范系综（见第 2 章）。在我们的这个格点体系上，轻赝标量介子 $\eta_{(2)}$ 是能量最低的赝标量强子系统，因此也是一个稳定粒子，远离多强子散射态的阈值，理论上可以更容易清晰地描述。所以，我们从 $\eta_{(2)}$ 入手来验证此类格点研究的可行性。 $\eta_{(2)}$ 的辐射产率这个课题也有其本身的重要理论价值，因为实验上发现赝标量介子在 J/ψ 辐射衰变中通常有较大的产率，其背后的物理是十分值得探究的。

表 4-1 无量纲的在壳形状因子 $V(0)$ 在不同 J/ψ 辐射衰变赧标量末态的实验值Table 4-1 Dimensionless on shell form factor $V(0)$ for J/ψ radiatively decaying into different final state pseudoscalars X .

X	m_X (MeV)	$\text{Br}(J/\psi \rightarrow \gamma X)$	$V(0)$
η	547.862(17)	$1.108(27) \times 10^{-3}$	0.00956(15)
$\eta'(958)$	957.78(6)	$5.25(7) \times 10^{-3}$	0.02565(29)
$\eta(1405/1475)$	1441.9(2.2)	$> 4.88(72) \times 10^{-3}$	$> 0.0344(26)$
$\eta(1760)$	1751(15)	$> 2.11(34) \times 10^{-3}$	$> 0.0298(25)$
$X(1835)$	1827(13)	$> 3.80(34) \times 10^{-4}$	$> 0.01369(65)$
$\eta(2225)$	2221(13)	$3.14(50) \times 10^{-4}$	0.0209(17)

4.1 背景介绍

J/ψ 辐射衰变中轻强子的产生主要通过 J/ψ 发射一个光子后湮灭到数个 (至少 2 个) 胶子, 这一过程中产生了大量胶子, 通过因此, 某种轻强子在 J/ψ 辐射衰变中相当大的分支比可能意味着它们是胶球的候选者或者主要是胶球成分。实验上, 赧标量介子就通常在辐射衰变中拥有较大的产率, 例如 η' 相应的分支比就大到 $\text{Br}[J/\psi \rightarrow \gamma \eta'(958)] = 5.25(7) \times 10^{-3}$ ^[1]。然而众所周知, η' 介子已然被确定为一种隶属于最轻的赧标量介子组成的 SU(3) 味道九重态的 $q\bar{q}$ 介子。理论上, 淬火格点 QCD 计算预言了赧标量胶球的质量大约在 2.4~2.6 GeV^[67-69], 这一结论也被完整的格点 QCD 模拟确认^[112, 191-193]。这些结果同样不支持 η' 和其他低于 2 GeV 的赧标量介子作为胶球候选者。因此, 这些介子在 J/ψ 辐射衰变中较大的产率需要其他的解释来理解。一个可能的原因是 QCD $U_A(1)$ 反常非微扰地增强了胶子和味道单态赧标量介子之间的混合。通过从各种 $J/\psi \rightarrow \gamma X$ 过程的分支比测量值中消去运动学因子来抽取无量纲的形状因子 $V(0)$ (X 是某种赧标量态), 在表 4-1 中列举, 我们可以发现这些形状因子基本上处于一个数量级, 并且与纯规范赧标量胶球的相应数值 0.0246(43) 接近^[216]。这说明可能有一种通用的理论机制, 即 $U_A(1)$ 反常在 J/ψ 辐射衰变到赧标量的过程中有重要作用。尽管以上讨论可能是个合理的解释, 数值上计算这些赧标量的产率来确认这一可能性仍然是重要的。我们在国际上首次在格点 QCD 上计算了 $J/\psi \rightarrow \gamma \eta_{(2)}$ 衰变过程的分宽度, 考虑到 $N_f = 2$ 中潜在的胶子动力学与 $N_f = 2 + 1$ 非常相似, $\eta_{(2)}$ 的结果可以容易地通过考虑相应的混合推广到 η 和 η' 。

4.2 公式

$J/\psi \rightarrow \gamma \eta_{(2)}$ 过程的分宽度与在壳的电磁形状因子 $M(Q^2 = 0)$ 相关,

$$\Gamma(J/\psi \rightarrow \gamma \eta_{(2)}) = \frac{4\alpha}{27} |\vec{q}_\gamma|^3 M^2(0), \quad (4-1)$$

表 4-2 规范系综参数

Table 4-2 Parameters of the gauge ensemble.

$L_s^3 \times L_t$	β	a_t^{-1} (GeV)	ξ	m_π (MeV)	N_{cfg}
$16^3 \times 128$	2.0	6.894(51)	~ 5.3	348.5(1.0)	6991

上式中已经包括了粲夸克的电荷 $Q_c = \frac{2}{3}e$, $\alpha = \frac{1}{134}$ 是粲夸克质量标度下的精细结构常数, $|\vec{q}_\gamma| = \frac{m_{J/\psi}^2 - m_{\eta_{(2)}}^2}{2m_{J/\psi}}$ 是末态光子的空间动量。形状因子 $M(Q^2)$ 通过该过程转移矩阵元的多极分解定义^[178],

$$\langle \eta_{(2)}(p_{\eta_{(2)}}) | j_{\text{em}}^\mu(0) | J/\psi(p_{J/\psi}, \lambda) \rangle = M(Q^2) \epsilon^{\mu\nu\rho\sigma} p_{J/\psi, \nu} p_{\eta_{(2)}, \rho} \epsilon_\sigma(p_{J/\psi}, \lambda), \quad (4-2)$$

$Q^2 = -(p_{\eta_{(2)}} - p_{J/\psi})^2$, $\epsilon_\sigma(p_{J/\psi}, \lambda)$ 是 J/ψ 的极化矢量, 并且有粲夸克电磁流 $j_{\text{em}}^\mu = \bar{c}\gamma_\mu c$ 。当末态光子从海夸克或者末态中发射时, 粲夸克至少需要湮灭到 3 个以上较硬的胶子中间态 (Landau-Yang 定理的 QCD 版本), 考虑数幂律, 这一过程相比两胶子中间态是被 $\mathcal{O}(\alpha_s^2)$ 压低的, 因此我们可以仅考虑初态辐射并忽略从海夸克或末态中发射的光子。理论上矩阵元可以从以下三点关联函数中抽取,

$$C_{\mu i}^{(3)}(\vec{q}; t, t') = \sum_{\vec{y}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{y}} \langle \mathcal{O}_{\eta_{(2)}}(\vec{p}'; t) j_{\text{em}}^\mu(\vec{y}, t') \mathcal{O}_{J/\psi, i}^\dagger(\vec{p}; 0) \rangle, \quad (4-3)$$

有 $\vec{q} = \vec{p}' - \vec{p}$, $\mathcal{O}_{\eta_{(2)}}(\vec{p}; t)$ 和 $\mathcal{O}_{J/\psi}(\vec{p}; t)$ 分别是 J/ψ 和 $\eta_{(2)}$ 态的内插场算符, 经过 Fourier 变换到相应的空间动量上。因此, 研究的主要任务就是计算 $\Gamma_{\mu i}^{(3)}(\vec{q}; t, t')$, 这可以直接在格点上进行。由于衰变发生在粲夸克到轻夸克由胶子介导的转移中, 需要使用蒸馏方法^[87] 计算该过程所必须的夸克湮灭图。

4.3 数值细节

我们在 $L_s \times L_t = 16^3 \times 128$ 各向异性的格点上生成了一个规范组态^[217], 使用了蝌蚪图改进的 Symanzik 规范作用量^[67, 69] 和蝌蚪图改进的四叶草作用量^[112-113], 有 $N_f = 2$ 简并的 u, d 夸克。重整化的各向异性 $\xi = a_s/a_t \approx 5.3$, 格距参数 $a_t^{-1} = 6.894(51)$ GeV。因此, 空间方向的格距 $a_s = 0.152(1)$ fm, 夸克质量参数对应的 π 介子质量 $m_\pi = 348.5(1.0)$ MeV。 $m_\pi a_s L_s \approx 3.9$ 保证了此格点配置上有限体积效应可以忽略, 使用了 6991 个组态用以保证含有非联通夸克图的关联函数有较好的信噪比。这些规范系综参数在表 4-2 中列出。对于价粲夸克, 我们采用了文章^[163] 中的四叶草作用量形式, 粲夸克质量参数被调整为使得 $\frac{1}{4}(m_{\eta_c} + 3m_{J/\psi}) = 3069$ MeV, 这给出 η_c 和 J/ψ 的质量分别为 $m_{\eta_c} = 2.9750(3)$ GeV 和 $m_{J/\psi} = 3.0988(4)$ GeV。在每个规范组态上, 我们生成了 u, d 夸克的馏分传播子, 可以使用它们方便地计算轻夸克地湮灭图^[87], 相应的 Laplacian Heaviside (LH) 子空间由 $N_{\text{eig}} = 70$ 个 Laplacian 本征值最小的本征矢量构成, 它们是正交归一的。

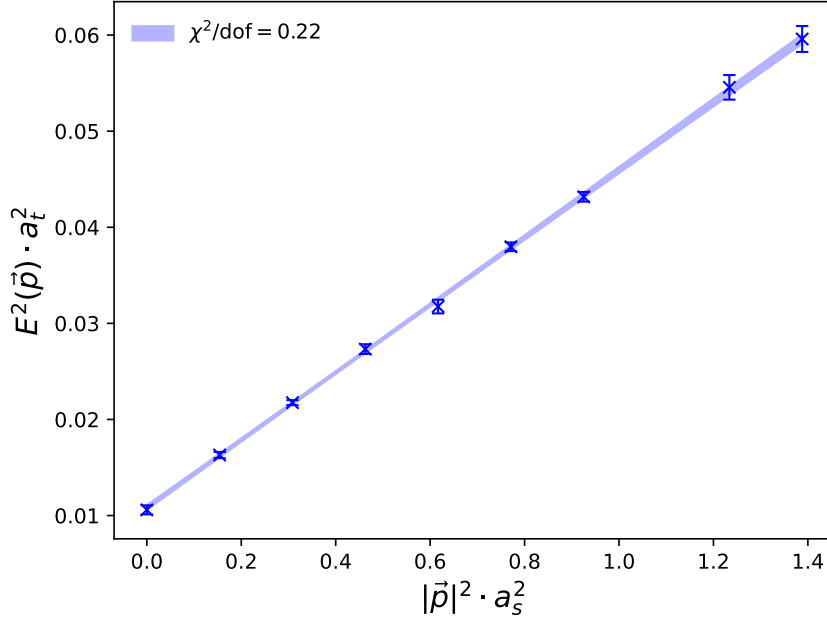

 图 4-1 $\eta_{(2)}$ 的色散关系

Figure 4-1 The dispersion relation for $\eta_{(2)}$. The data points show the numerical results, and the band exhibits the error of the fitting. The continuum dispersion relation $E^2(\vec{p})a_t^2 = m_{\eta_{(2)}}^2 a_t^2 + \frac{1}{\xi^2} |\vec{p}|^2 a_s^2$ is applied, and the fitted parameters are $\xi = 5.336(36)$ and $m_{\eta_{(2)}} = 718(8)$ MeV.

同位旋单态赝标量介子 $\eta_{(2)}$ 的算符集合包括了 3 种不同的算符。 $\mathcal{O}_{\eta_{(2)}}$ 的形式为 $\frac{1}{\sqrt{2}} (\bar{u}\Gamma u + \bar{d}\Gamma d)$, u, d 都是经过 LH 涂摩的夸克场, Γ 取值为 $\gamma_4\gamma_5$, $\gamma_4\gamma_5\gamma_i\nabla_i$ 或 $\gamma_4\gamma_i\mathbb{B}_i$ [70]。此处 $\nabla \equiv \bar{\nabla} - \vec{\nabla}$, $\bar{\nabla}$ ($\vec{\nabla}$) 是作用在右 (左) 侧夸克场的规范协变导数算符, \mathbb{B} 是 ∇ 的反对称组合 $\mathbb{B}_i = \epsilon_{ijk} \nabla_j \nabla_k$ 。对于带有空间动量 $\vec{p} = \frac{2\pi}{a_s L_s} \vec{n}_p$ 的 $\eta_{(2)}$ 算符则通过 Fourier 变换获得。由此, 对于每一个 \vec{p} , 我们通过求解这个算符集合的关联函数矩阵的广义本征值问题, 可以获得耦合到 $\eta_{(2)}$ 基态的优化算符 $\mathcal{O}_{\eta_{(2)}}$ 。空间动量模式 \vec{n}_p 从 $(0,0,0)$ 取到 $(1,2,2)$, 保证 $Q^2 \sim 0$ 可以被满足。由于 $\eta_{(2)}$ 在每个动量模式下都是最轻的态, 尽管 Fourier 变换后的算符会耦合到其他 J^{PC} 量子数而非 0^{-+} 的态上 [156], 不会影响到我们的研究目标。图 4-1 中展示的可以正确被 $\xi \approx 5.3$ 描述的 $\eta_{(2)}$ 色散关系确认了这一点, 其中 $E(\vec{p})$ 是关联函数 $C_{\eta_{(2)}\eta_{(2)}}^{(2)}$ 中的基态能量, 图中的直线是采用连续色散关系 $\Gamma_{\eta_{(2)}\eta_{(2)}}^{(2)}(\vec{p}, t) = \langle \mathcal{O}_{\eta_{(2)}}(\vec{p}; t) \mathcal{O}_{\eta_{(2)}}^\dagger(\vec{p}; 0) \rangle$ 拟合的结果, 相应拟合参数为 $m_{\eta_{(2)}} = 718(8)$ MeV, $\xi = 5.336(36)$ 。

我们使用了连续形式的赧夸克电磁流 $j_{\text{em}}^\mu(x) = \bar{c}(x)\gamma_\mu c(x)$, 这在格点上不守恒并需要进行重整化。我们采用了文章 [178-179] 中的策略来确定重整化系数 Z_V 。通过计算 η_c 相应的电磁形状因子, 我们获得了 j_{em}^μ 时间分量对应的 $Z_V^s = 1.165(3)$ 和空间分量对应的 $Z_V^l = 1.118(4)$ 。本研究中仅仅使用了 Z_V^s 用于计算, 并将在隐含接下来的表达式中。

在 J/ψ 的静止参考系中, 我们使用夸克双线性型 $\sum_{\vec{z}} \bar{c}(\vec{z}, t) \gamma_i c(\vec{z}, t)$ 表示在

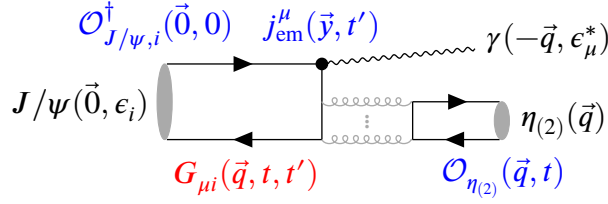

 图 4-2 $J/\psi \rightarrow \gamma \eta_{(2)}$ 过程的示意图

 Figure 4-2 The schematic diagram for the process $J/\psi \rightarrow \gamma \eta_{(2)}$.

三点关联函数中的相应算符 $\mathcal{O}_{J/\psi,i}(\vec{0}; t)$ 。因为粲夸克和轻夸克是分别进行收缩的，因此对于 J/ψ 静止和 $\eta_{(2)}$ 以 \vec{q} 运动的运动学设置，将 $C_{\mu i}^{(3)}(\vec{q}; t, t')$ 重新表达为

$$C_{\mu i}^{(3)}(\vec{q}; t, t') = \frac{1}{L_t} \sum_{\tau=0}^{L_t-1} \langle \mathcal{O}_{\eta_{(2)}}(\vec{q}; \tau + t) G_{\mu i}(\vec{q}; \tau + t', \tau) \rangle, \quad (4-4)$$

$G_{\mu i}$ 定义为

$$G_{\mu i}(\vec{q}; \tau + t', \tau) = \sum_{\vec{y}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{y}} j_{em}^\mu(\vec{y}; \tau + t') \mathcal{O}_{J/\psi,i}^\dagger(\vec{0}; \tau), \quad (4-5)$$

我们循环并平均了 J/ψ 算符的时间坐标 $\tau \in [1, L_t]$ 以提高信噪比。Wick 收缩后的 $C_{\mu i}^{(3)}$ 夸克示意图见图 4-2，图中左侧的粲夸克圈描述了 $G_{\mu i}$ 因子，右侧的轻夸克圈则来源于 $\mathcal{O}_{\eta_{(2)}}$ 的自收缩。在每个组态上，这两部分都是分别被计算的，注意轻夸克圈需要使用 u, d 夸克的馏分传播子计算。为了计算 $G_{\mu i}$ 部分，事实上这一部分类似于一个 J/ψ 的两点函数，我们在所有时间 τ 上采用面源来计算粲夸克传播子 $S_{\text{Wall}}(\vec{y}; \tau + t, \tau) = \sum_{\vec{x}} S_c(\vec{y}, \tau + t; \vec{x}, \tau)$ ，因此图 4-2 中 s 的粲夸克圈可以使用这些传播子计算

$$\begin{aligned} G_{\mu i}(\vec{q}; \tau + t, \tau) &= \frac{1}{L_t} \sum_{\tau=0}^{L_t-1} \sum_{\vec{x}, \vec{y}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{y}} \text{tr} \left[\gamma_5 S_c^\dagger(\vec{y}, \tau + t; \vec{x}, \tau) \gamma_5 \gamma_\mu S_c(\vec{y}, \tau + t; \vec{x}, \tau) \gamma_i \right] \\ &\rightarrow \frac{1}{L_t} \sum_{\tau=0}^{L_t-1} \sum_{\vec{x}, \vec{x}', \vec{y}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{y}} \text{tr} \left[\gamma_5 S_c^\dagger(\vec{y}, \tau + t; \vec{x}', \tau) \gamma_5 \gamma_\mu S_c(\vec{y}, \tau + t; \vec{x}, \tau) \gamma_i \right] \\ &= \frac{1}{L_t} \sum_{\tau=0}^{L_t-1} \sum_{\vec{y}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{y}} \text{tr} \left[\gamma_5 S_{\text{Wall}}^\dagger(\vec{y}; \tau + t, \tau) \gamma_5 \gamma_\mu S_{\text{Wall}}(\vec{y}; \tau + t, \tau) \gamma_i \right], \end{aligned} \quad (4-6)$$

第二行相比第一行多余的项都是规范变的（没有形成时空上首尾相接的夸克圈），因此可以期望在大统计量下这些项经过规范组态平均后被消去。需要强调的是，在计算 $G_{\mu i}$ 时初态算符 $\mathcal{O}_{J/\psi,i}(\vec{p}; t)$ 需要投影到特定的动量上（在此研究中有 $\vec{p} = \vec{0}$ ），否则我们无法得到三点关联函数 $C_{\mu i}^{(3)}$ 有效的信号。

当 $t \gg t'$ 且 $t' \gg 0$ 时, 有对三点关联函数 $C_{\mu i}^{(3)}(\vec{q}; t, t')$ 的近似

$$C_{\mu i}^{(3)}(\vec{q}; t, t') \approx \frac{Z_{\eta_{(2)}}(\vec{q}) Z_{J/\psi}^*}{4V E_{\eta_{(2)}}(\vec{p}) m_{J/\psi}} e^{-E_{\eta_{(2)}}(\vec{p})(t-t')} e^{-m_{J/\psi} t'} \times \sum_{\lambda} \langle \eta_{(2)}(\vec{q}) | j_{\text{em}}^{\mu} | J/\psi(\vec{0}, \lambda) \rangle \epsilon_i^*(\vec{0}, \lambda), \quad (4-7)$$

其中 $V = L_s^3$ 是格点空间体积, $Z_{\eta_{(2)}}(\vec{q}) = \langle \Omega | \mathcal{O}_{\eta_{(2)}}(\vec{q}) | \eta_{(2)}(\vec{q}) \rangle$, $Z_{J/\psi} \epsilon_i(\vec{0}, \lambda) = \langle \Omega | \mathcal{O}_{J/\psi, i}(\vec{0}) | J/\psi(\vec{0}, \lambda) \rangle$, ϵ 是 J/ψ 对应的极化矢量, λ 是极化方向。 $Z_{\eta_{(2)}}$ 关于 \vec{q} 的依赖来源于 LH 涂摩的算符 $\mathcal{O}_{\eta_{(2)}}$ [87]。仅考虑基态贡献, $\eta_{(2)}$ 和 J/ψ 的两点关联函数可以参数化为

$$C_{\eta_{(2)}\eta_{(2)}}^{(2)}(\vec{q}, t) \approx \frac{|Z_{\eta_{(2)}}(\vec{q})|^2}{2E_{\eta_{(2)}}(\vec{q})V} \left[e^{-E_{\eta_{(2)}}(\vec{q})t} + e^{-E_{\eta_{(2)}}(\vec{q})(L_t-t)} \right], \quad (4-8)$$

$$C_{J/\psi J/\psi, ii}^{(2)}(t) \approx \frac{|Z_{J/\psi}|^2}{2m_{J/\psi}V} \left[e^{-m_{J/\psi}t} + e^{-m_{J/\psi}(L_t-t)} \right].$$

结合公式 (4-7, 4-8), 可以抽取矩阵元 $\langle \eta_{(2)}(\vec{q}) | j_{\text{em}}^{\mu} | J/\psi(\vec{0}, \lambda) \rangle$ 。在运动学配置式 (4-4) 下, 有 $Q^2 = |\vec{q}|^2 - [m_{J/\psi} - E_{\eta_{(2)}}(\vec{q})]^2$, 那么对于某个特定的 \vec{q} , 再结合式 (4-2) 可以抽取相应的形状因子 $M(Q^2)$ 。首先定义关联函数之间的比值 $\mathcal{R}_{\mu i}$

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{\mu i}(\vec{q}; t, t') &= \frac{C_{\mu i}^{(3)}(\vec{q}; t, t')}{C_{\eta_{(2)}\eta_{(2)}}^{(2)}(\vec{q}; t-t') C_{J/\psi, J/\psi}^{(2)}(\vec{0}; t')} \\ &\approx \frac{V}{Z_{\eta_{(2)}}^*(\vec{q}) Z_{J/\psi}} \times \sum_{\lambda} \langle \eta_{(2)}(\vec{q}) | j_{\text{em}}^{\mu} | J/\psi(\vec{0}, \lambda) \rangle \epsilon_i^*(\vec{0}, \lambda) \\ &= \frac{V}{Z_{\eta_{(2)}}^*(\vec{q}) Z_{J/\psi}} \times M(Q^2) \epsilon^{\mu 0 \rho \sigma} m_{J/\psi} q_{\rho} \delta_{i\sigma} \\ &= \frac{M(Q^2) m_{J/\psi} V}{Z_{\eta_{(2)}}^*(\vec{q}) Z_{J/\psi}} \epsilon^{i\mu j} q_j, \end{aligned} \quad (4-9)$$

显然有

$$M(Q^2) = \epsilon^{i\mu j} \frac{\mathcal{R}_{\mu i}(\vec{q}; t, t')}{q_j} \times \frac{Z_{\eta_{(2)}}^*(\vec{q}) Z_{J/\psi}}{m_{J/\psi} V}. \quad (4-10)$$

我们发现当 $t' \geq 40$ 时 J/ψ 在三点关联函数 $C_{\mu i}^{(3)}(\vec{q}; t, t')$ 中占据主要贡献 ($> 99\%$, 相较其他粲夸克构成的 1^{--} 激发态), 因此对于每个 Q^2 , 我们固定 $t' = 40$ 并在 $t > t'$ 区间上得到 $M(Q^2, t)$ 。图 4-3 展示了数个接近于 0 的 Q^2 值下 $M(Q^2, t)$ 关于 t 的依赖。可以看到在 $t - t' > 10$ 的区间各条曲线开始出现平台区域, $M(Q^2)$ 也从对平台的常数拟合中获得。实线指示了拟合的中心值和拟合区间, 上下两侧的同色虚线则代表着刀切法重抽样获得的误差。我们也尝试使用函

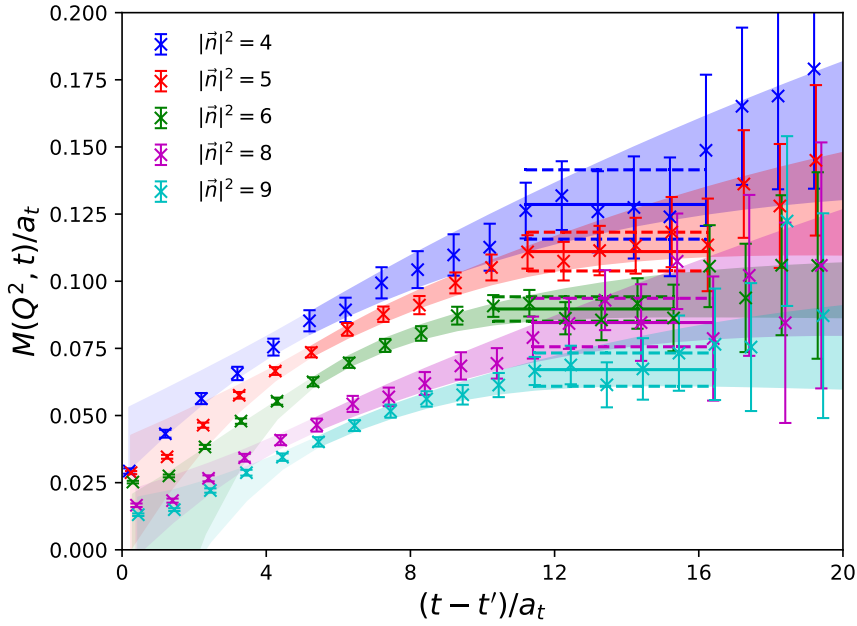

 图 4-3 在 $t' = 40$ 时形状因子 $M(Q^2, t)$ 随 $t - t'$ 的变化

Figure 4-3 Form factors $M(Q^2, t)$ versus $t - t'$ with $t' = 40$. Different colors indicate different $|\vec{n}|^2$, which lead to some near-zero Q^2 . The horizontal solid lines along with dashed lines illustrate the fitted values and errors of $M(Q^2)$ with constants as fitting formulas, and the fitting ranges are shown as ranges of these lines. The shaded bands are fitting results to the data points by using $M(Q^2, t) = M(Q^2) + c(Q^2)e^{-\delta E(t-t')}$ as fitting formulas. All the errors are obtained by jackknife resampling.

 表 4-3 $E_{\eta_{(2)}}$, Q^2 和 $M(Q^2)$ 在不同动量模式 \vec{n}_p 下的拟合值

Table 4-3 The values for $E_{\eta_{(2)}}$, Q^2 , and $M(Q^2)$ at different momentum mode \vec{n}_p . All the values are converted into the physical unit using $a_t^{-1} \approx 6.894$ GeV.

\vec{n}_p	(0, 0, 1)	(0, 1, 1)	(1, 1, 1)	(0, 0, 2)
$E_{\eta_{(2)}}(\vec{p})$ (GeV)	0.8801(87)	1.0167(61)	1.139(11)	1.228(14)
Q^2 (GeV ²)	-4.668(39)	-3.819(25)	-3.062(42)	-2.460(52)
$M(Q^2)$ (GeV ⁻¹)	0.0490(57)	0.0291(20)	0.0222(15)	0.0187(19)
\vec{n}_p	(0, 1, 2)	(1, 1, 2)	(0, 2, 2)	(1, 2, 2)
$E_{\eta_{(2)}}(\vec{p})$ (GeV)	1.3434(80)	1.4324(83)	1.610(19)	1.683(19)
Q^2 (GeV ²)	-1.782(28)	-1.216(28)	-0.132(56)	0.340(54)
$M(Q^2)$ (GeV ⁻¹)	0.0161(10)	0.01301(66)	0.0123(13)	0.00973(90)

数形式 $M(Q^2, t) = M(Q^2) + c(Q^2)e^{\delta E(t-t')}$ 对数据在小 $t - t'$ 进行拟合 (图中的彩色阴影即为拟合结果), 幂指数项由高激发态的贡献引入。通过这种方式获得的 $M(Q^2)$ 与常数拟合得到的结果在误差范围内吻合, 但是它的误差值大得多。因此我们选用了常数拟合的 $M(Q^2)$ 值作为最终结果, 所有的拟合区间和拟合值在

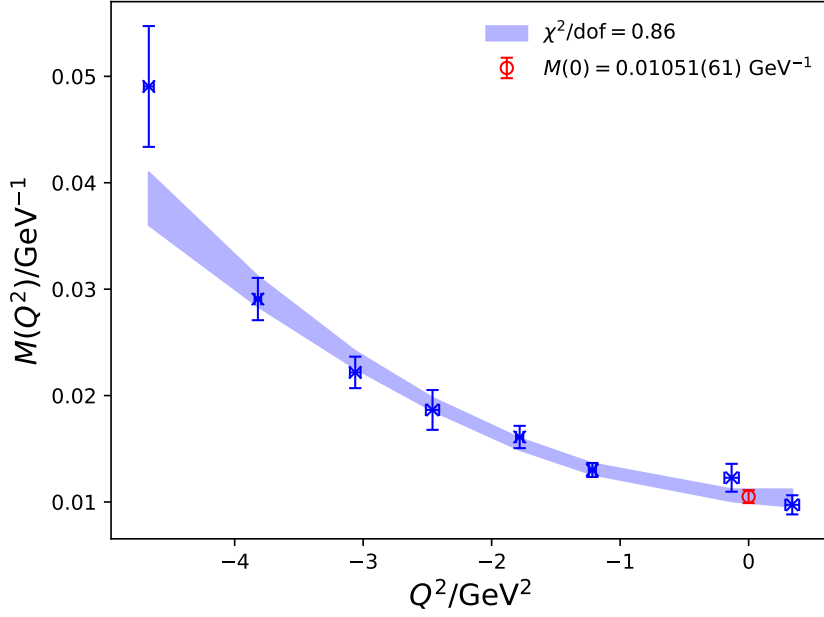


图 4-4 $M(Q^2)$ 随 Q^2 的变化

Figure 4-4 From factor $M(Q^2)$ with respect to Q^2 in the physical unit. Data points indicate the numerical results. The bars present error values that are derived through jack-knife resampling. The shaded curve illustrates the interpolation using the polynomial $M(Q^2) = M(0) + aQ^2 + bQ^4$. The red circle with error bar exhibits the fitted form factor $M(0) = 0.01051(61) \text{ GeV}^{-1}$.

表 4-3 中列出。

为了使用公式 (4-1) 预言 $J/\psi \rightarrow \gamma\eta_{(2)}$ 过程的分宽度，需要得到在壳的形状因子 $M(Q^2 = 0)$ ，这可以通过对 $M(Q^2)$ 函数进行 Q^2 上的插值得到，实践中，我们采用了二阶多项式的形式 $M(Q^2) = M(0) + aQ^2 + bQ^4$ 进行插值。图 4-4 展示了 $M(Q^2)$ 随 Q^2 变化的关系，并且使用插值公式拟合得到的带状阴影在 Q^2 取值区间内非常好地描述了它的行为，最终给出在壳的值 $M(0) = 0.01051(56) \text{ GeV}^{-1}$ (图中的红点)。将这一数值代回式 (4-1)，使用 J/ψ 的总宽度 $\Gamma = 92.6(1.7) \text{ keV}$ ，最终我们预言 $J/\psi \rightarrow \gamma\eta_{(2)}$ 过程的分宽度和分支比为

$$\begin{aligned} \Gamma(J/\psi \rightarrow \gamma\eta_{(2)}) &= 0.385(45) \text{ keV} \\ \text{Br}[J/\psi \rightarrow \gamma\eta_{(2)}] &= 4.16(49) \times 10^{-3}. \end{aligned} \quad (4-11)$$

4.4 讨论

式 (4-11) 中 $J/\psi \rightarrow \gamma\eta_{(2)}$ 过程的分支比已经与实验值 $\text{Br}[J/\psi \rightarrow \gamma\eta'] = 5.25(7) \times 10^{-3}$ [1]，我们可以进一步通过下文中的步骤做一个更合理的对比。首先，辐射衰变到 $\eta_{(2)}$ 的在壳形状因子 $M(0) = 0.01051(61) \text{ GeV}^{-1}$ 与纯规范赧标量胶球的结果 $M(0) = 0.0090(16) \text{ GeV}^{-1}$ 非常接近，可以说没有观察到数幂律

导致的对 $q\bar{q}$ 介子末态 $\mathcal{O}(\alpha_s^2)$ 的压低。其次，实验上辐射衰变中各个赝标量介子末态，例如 η' , $\eta(1405/1475)$, $\eta(1760)$, $X(1835)$ 和 $\eta(2225)$ 都有较大的分支比，它们的有效耦合常数在量级上一致^[216]。那么在这些实验事实背后可能存在一种通用的机制，其中 QCD $U_A(1)$ 反常可以非微扰地增强胶子和赝标量之间的耦合，因此可能是其中最重要的，正如手征极限下反常的轴矢流关系给出

$$\partial_\mu j_5^\mu(x) = \sqrt{N_f} \frac{g^2}{32\pi} G_{\mu\nu}^a(x) \tilde{G}^{a,\mu\nu}(x) \equiv \sqrt{N_f} q(x), \quad (4-12)$$

有 N_f 个味道的味道单态轴矢流 $j_5^\mu = \frac{1}{\sqrt{N_f}} \sum_{k=1}^{N_f} \bar{q}_k \gamma_5 \gamma^\mu q_k$ ，其中 $q(x)$ 实际上是拓扑荷密度的定义。上式同时指出反常的胶子与赝标量之间的耦合效应正比于 $\sqrt{N_f}$ 。因此，若 $M(0)$ 主要由 $U_A(1)$ 反常贡献，那么对于物理的 SU(3) 情形，可以有近似关系 $M(0, N_f = 3) = \sqrt{\frac{3}{2}} M(0, N_f = 2) = 0.01287(75) \text{GeV}^{-1}$ 。另一方面，物理的 η 和 η' 态实际上是 SU(3) 味道对称性下的质量本征态，并且由味道单态 η_1 和味道八重态 η_8 混合得到，考虑有混合角 θ ，

$$|\eta\rangle = \cos\theta|\eta_8\rangle - \sin\theta|\eta_1\rangle, \quad |\eta'\rangle = \sin\theta|\eta_8\rangle + \cos\theta|\eta_1\rangle. \quad (4-13)$$

代入实验值 $m_\eta = 548 \text{ MeV}$ 和 $m_{\eta'} = 958 \text{ MeV}$ ，我们可以预言 $J/\psi \rightarrow \gamma\eta(\eta')$ 的分支比。取线性的 Gell-Mann-Okubo 质量关系得到的 $\theta_{\text{lin}} = -24.5^\circ$ ^[1]，

$$\text{Br}[J/\psi \rightarrow \gamma\eta] = 1.15(14) \times 10^{-3}, \quad (4-14)$$

$$\text{Br}[J/\psi \rightarrow \gamma\eta'] = 4.49(53) \times 10^{-3}. \quad (4-15)$$

或者取平方的 Gell-Mann-Okubo 质量关系得到的 $\theta_{\text{quad}} = -11.3^\circ$ ^[1]，

$$\text{Br}[J/\psi \rightarrow \gamma\eta] = 0.256(30) \times 10^{-3}, \quad (4-16)$$

$$\text{Br}[J/\psi \rightarrow \gamma\eta'] = 5.21(62) \times 10^{-3}. \quad (4-17)$$

显然， η 的辐射衰变产率对于 θ 非常敏感。考虑实验上的数值 $\text{Br}[J/\psi \rightarrow \gamma\eta] = 1.11(3) \times 10^{-3}$ ， θ_{quad} 显得过于小了，而 θ_{lin} 则几乎在误差内复现了实验结果，这表示在此选取 θ_{lin} 是更合适的。我们注意到一个最近的关于 η 和 η' 精细的格点研究计算了拓扑荷密度 $q(x)$ 关于真空和 $\eta(\eta')$ 态的矩阵元 $a_{\eta(\eta')}$ ^[201]，从中可以推导出能标 $\mu = 2 \text{ GeV}$ 下的胶子型混合角 $\theta_g = -\arctan \frac{a_\eta}{a_{\eta'}} \approx -24(4)^\circ$ 。如果 $U_A(1)$ 反常在 $J/\psi \rightarrow \gamma\eta(\eta')$ 过程中占据主要贡献，就应当使用 θ_g 来从我们的结果推导相应的分支比，这与式 (4-14) 中的结果非常接近，且与实验值也符合地较好。这表明 $U_A(1)$ 反常确实在 J/ψ 辐射衰变的过程中有着重要作用。一个在格点上对 $D_s \rightarrow \eta'$ 半轻衰变过程进行的研究同样观察到了 $U_A(1)$ 反常的重要性^[208]，其中非联通图的贡献可以与连通图相当。

4.5 小结

我们首次在 $N_f = 2$ ，相应 $m_\pi \approx 350 \text{ MeV}$ 的格点 QCD 中研究了 J/ψ 辐射衰变到同位旋单态赝标量介子 $\eta_{(2)}$ 的过程。相关的夸克联通图和非连通图部

分都使用蒸馏方法计算。在一个大约有 7000 个组态的规范系综下，我们在插入了一个电磁流的三点关联函数上获得了较好的信噪比。通过 $\eta_{(2)}$ 的色散关系得到 $m_{\eta_{(2)}} = 718(8)$ 。通过抽取不同转移动量下的电磁形状因子 $M(Q^2)$ ，对 Q^2 做插值得到在壳的形状因子 $M(0) = 0.01051(61) \text{ GeV}^{-1}$ ，可以计算相应的分宽度 $\Gamma(J/\psi \rightarrow \gamma \eta_{(2)}) = 0.385(45) \text{ keV}$ 和分支比 $\text{Br}[J/\psi \rightarrow \gamma \eta_{(2)}] = 4.16(49) \times 10^{-3}$ 。通过假设 $U_A(1)$ 反常在这类衰变中占主要贡献，并考虑 η 和 η' 之间的混合，我们的结果给出了 η 和 η' 介子在 J/ψ 辐射衰变中产率的理论预言：在选择混合角为 $\theta_{\text{lin}} = -24.5^\circ$ 时，得到 η 和 η' 在 J/ψ 中的辐射产率分别为 $1.15(14) \times 10^{-3}$ 和 $4.49(53) \times 10^{-3}$ ，这和实验值 $1.13(3) \times 10^{-3}$ 和 $5.25(7) \times 10^{-3}$ 在误差范围内相符，这也进一步反映了我们假设 QCD 的轴反常在过程起主导作用的合理性。

我们的结果显示了格点 QCD 在研究 J/ψ 辐射衰变到轻强子末态的过程中有巨大的潜力。另外，我们也完成了 $I^G J^{PC}$ 的轻混杂态 η_1 在 J/ψ 辐射衰变中的产率的计算。

第5章 总结和展望

粒子物理标准模型自建立以来已经取得了辉煌的成就，理论预言可以与实验在相当高的精度上相符。QCD 是其中描述强相互作用的部分，由于 QCD 渐近自由的性质，使得微扰论仅能在高能标处生效。低能标区域的 QCD 研究需要一种非微扰的方法，格点 QCD 就从第一性原理出发，使用计算机非微扰地对 QCD 系统进行数值模拟。格点 QCD 凭借其误差可以被控制的特点已经成为 QCD 非微扰计算最重要的理论工具。

格点 QCD 的发展与计算机技术的进步密不可分。由于格点 QCD 需要求解的线性方程组规模巨大，人们甚至需要使用超级计算机来完成计算，研究人员也发展了各种软件以期更好地利用现有算力。在格点 QCD 研究中，最为消耗算力和时间的步骤毫无疑问是规范系综的生成，这导致国际上往往以合作组的方式开展具体研究工作。随着近年计算机技术的发展和进步，我国也开始注意到自主产生组态的重要性，我们也有了第一批依托于自有计算资源产生的数个规范系综。我们的研究基于其中一个在各向异性格子上含有 $N_f = 2$ 简并动力学夸克的系综，其中含仅有 7000 个组态，大统计量和时间方向的高分辨率使得它非常适合于重夸克，胶球，混杂态相关的各种物理问题。我们提出了一种全新的格距定标方案，经过验证它有着比传统的 Wilson 流方案更弱的夸克质量依赖，并且在手征极限下与 Wilson 流方案的结果在误差范围内一致。我们在研究中大量采用了蒸馏方法，针对其数据特点使用 Python 和一些数值计算库编写了一套软件包，在 GPU 上实现了完整的蒸馏方法流程，为未来我们更多的基于蒸馏方法的研究提供软件支持，促进从组态到物理结果的更快的转化。同时，我们和国内的同行目前正在生成更多格距，更多体积，更接近物理点的规范系综，正在向着国际主流水平快速靠近。未来数年，可以预期我国的格点研究将会进入前所未有的上升期。

BEPCII/BESIII 累积了大量的 J/ψ 事例样本，人们预期基于该样本，可以对胶球的存在与否给出结论。 J/ψ 辐射衰变由于其对末态系统的量子数很强的限制，以及粲夸克湮灭产生的大量胶子，被认为是寻找胶球的上佳场所。我们的工作就基于这一物理目标，以及更早的格点 QCD 对 J/ψ 辐射衰变的胶球的产率预言，希望在格点 QCD 的框架中直接计算 J/ψ 辐射衰变到轻强子末态过程的产率，为实验上寻找胶球提供更完整的理论依据。此前的淬火格点 QCD 研究已经给出了标量，张量以及赝标量胶球的产率，我们也同样关注这些量子数的轻强子末态产率。由于 $N_f = 2$ 情形下的味道单态赝标量介子 $\eta_{(2)}$ 容易清晰地描述，我们首先选择了 $\eta_{(2)}$ 作为我们的研究对象，希望以此验证格点上进行此类计算的可能性。

首先我们考虑 $\eta_{(2)}$ 和赝标量胶球的混合，因为有理论观点认为 η' （基本上是味道单态的，是 $\eta_{(2)}$ 在 $N_f = 3$ 情形下的对应粒子）有较大的赝标量胶球成分。

我们通过 $\eta_{(2)}$ 与赝标量胶球算符之间的两点关联函数，抽取了相应的混合能量和混合角绝对值为 $|x| = 107(15)(2) \text{ MeV}$ 和 $|\theta| = 3.46(46)^\circ$ 。它们都非常小，因此我们认为在后续关于 $\eta_{(2)}$ 性质的研究中可以忽略混合的贡献。另外我们还通过 Witten-Veneziano 机制确认了 QCD $U_A(1)$ 反常对 $\eta(\eta')$ 介子质量有很大的贡献。

之后我们计算了 $\eta_{(2)}$ 在 J/ψ 辐射衰变中的产率，这也是国际上首次在格点 QCD 中对 J/ψ 辐射衰变到轻强子的过程进行的研究。通过规范系综的大统计量和时间方向的高分辨率，我们在衰变过程的三点关联函数上得到了不错的信噪比。通过对矩阵元进行多级分解，并通过转移动量插值得到在壳的电磁形状因子 $M(0) = 0.01051(61) \text{ GeV}^{-1}$ ，进而假设 QCD $U_A(1)$ 反常在该过程中占据主导，取 η 和 η' 之间的混合角 $\theta_{\text{lin}} = -24.5^\circ$ ，最终预言的 η 和 η' 在 J/ψ 辐射衰变中的产率与实验值在误差范围内相符。这进一步确认了 $U_A(1)$ 在这类过程的重要作用。

对于赝标量介子末态的研究已经证明了格点 QCD 在 J/ψ 辐射衰变到轻强子末态过程的巨大潜力，因此我们下一步的工作计划就是继续计算不同轻强子末态在 J/ψ 辐射衰变中的产率，从而能够更好地为 BESIII 提供关于寻找胶球的理论依据。目前我们已经完成了 $I^G J^{PC} = 0^+ 1^{-+}$ 末态的产率计算，还需要对标量和张量介子末态进行讨论。然而由于标量介子容易衰变，并有多强子末态能量（例如 $\pi\pi$ ）低于标量介子阈值，这使得对末态的分析非常复杂，我们正在探讨可能的解决方案。我们的研究仅使用了一个 $N_f = 2$ 的规范系综，导致无法对包括连续极限，手征外推，味道 $SU(2)$ 近似在内的各项系统误差有较好的估计。因此我们正在产生更多的格距，格点体积和 π 介子质量的规范系综，以期能够细致地对上述系统误差进行分析和估计，这也是我们的格点研究与国际前沿接轨的重要步骤。

目前，随着我国格点合作组 CLQCD 产生组态的流程逐渐完善，我们将可以针对性地根据物理问题定制组态的各项参数，从而更快、更好地完成物理目标。同时，我国的格点 QCD 软件也开始进入发展阶段，已经根据不同的国产超级计算机架构进行了适配，并且取得了一些成果。随着越来越多格点人才进入各大高校和研究所开始主导研究项目，研究队伍不断壮大，我国的格点 QCD 领域正在走上一条快速发展的道路。有理由相信，在未来数年内将会有大量国际一流水平的工作涌现，并逐渐重视自有的计算软件发展。我们也由衷希望本文的物理和软件工作能够为后续格点 QCD 发展指明一些方向，提供一点便利。

参考文献

- [1] Workman R L, et al. Review of Particle Physics[J]. PTEP, 2022, 2022: 083C01. DOI: [10.1093/ptep/ptac097](#).
- [2] Fodor Z, Hoelbling C. Light hadron masses from lattice QCD[J]. Rev. Mod. Phys., 2012, 84: 449. arXiv: [1203.4789 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1103/RevModPhys.84.449](#).
- [3] Jansen K, Liu C. Implementation of Symanzik's improvement program for simulations of dynamical Wilson fermions in lattice QCD[J]. Comput. Phys. Commun., 1997, 99: 221-234. arXiv: [hep-lat/9603008](#). DOI: [10.1016/S0010-4655\(96\)00128-2](#).
- [4] Gell-Mann M. The Eightfold Way: A theory of strong interaction symmetry[J]., 1961. DOI: [10.2172/4008239](#).
- [5] Ne'eman Y. Derivation of strong interactions from a gauge invariance[J]. Nucl. Phys., 1961, 26: 222-229. DOI: [10.1016/0029-5582\(61\)90134-1](#).
- [6] Gell-Mann M. A schematic model of baryons and mesons[J]. Phys. Lett., 1964, 8: 214-215. DOI: [10.1016/S0031-9163\(64\)92001-3](#).
- [7] Zweig G. An SU(3) model for strong interaction symmetry and its breaking. Version 1[J]., 1964.
- [8] Zweig G. An SU(3) model for strong interaction symmetry and its breaking. Version 2[M]// Lichtenberg D B, Rosen S P. DEVELOPMENTS IN THE QUARK THEORY OF HADRONS. VOL. 1. 1964 - 1978. [S.l. : s.n.], 1964: 22-101.
- [9] Greenberg O W. Spin and Unitary-Spin Independence in a Paraquark Model of Baryons and Mesons[J]. Phys. Rev. Lett., 1964, 13: 598-602. DOI: [10.1103/PhysRevLett.13.598](#).
- [10] Han M Y, Nambu Y. Three-Triplet Model with Double SU(3) Symmetry[J]. Phys. Rev., 1965, 139: B1006-B1010. DOI: [10.1103/PhysRev.139.B1006](#).
- [11] Fritzsch H, Gell-Mann M, Leutwyler H. Advantages of the color octet gluon picture[J]. Phys. Lett. B, 1973, 47: 365-368. DOI: [10.1016/0370-2693\(73\)90625-4](#).
- [12] Yang C N, Mills R L. Conservation of Isotopic Spin and Isotopic Gauge Invariance[J]. Phys. Rev., 1954, 96: 191-195. DOI: [10.1103/PhysRev.96.191](#).
- [13] 't Hooft G, Veltman M J G. Regularization and renormalization of gauge fields[J]. Nucl. Phys. B, 1972, 44: 189-213. DOI: [10.1016/0550-3213\(72\)90279-9](#).
- [14] Gross D J, Wilczek F. Ultraviolet Behavior of Nonabelian Gauge Theories[J]. Phys. Rev. Lett., 1973, 30: 1343-1346. DOI: [10.1103/PhysRevLett.30.1343](#).
- [15] Politzer H D. Reliable Perturbative Results for Strong Interactions?[J]. Phys. Rev. Lett., 1973, 30: 1346-1349. DOI: [10.1103/PhysRevLett.30.1346](#).
- [16] Wilson K G. Confinement of quarks[J]. Phys. Rev. D, 1974, 10: 2445-2459. DOI: [10.1103/PhysRevD.10.2445](#).
- [17] Aoki Y, et al. FLAG Review 2021[J]. Eur. Phys. J. C, 2022, 82(10): 869. arXiv: [2111.09849 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1140/epjc/s10052-022-10536-1](#).
- [18] Creutz M. Confinement and the Critical Dimensionality of Space-Time[J]. Phys. Rev. Lett., 1979, 43: 553-556. DOI: [10.1103/PhysRevLett.43.553](#).
- [19] Creutz M, Jacobs L, Rebbi C. Monte Carlo study of Abelian lattice gauge theories[J]. Phys. Rev. D, 1979, 20: 1915. DOI: [10.1103/PhysRevD.20.1915](#).

- [20] Creutz M. Monte Carlo study of quantized SU(2) gauge theory[J]. Phys. Rev. D, 1980, 21: 2308-2315. DOI: [10.1103/PhysRevD.21.2308](https://doi.org/10.1103/PhysRevD.21.2308).
- [21] Creutz M, Jacobs L, Rebbi C. Monte Carlo Computations in Lattice Gauge Theories[J]. Phys. Rept., 1983, 95: 201-282. DOI: [10.1016/0370-1573\(83\)90016-9](https://doi.org/10.1016/0370-1573(83)90016-9).
- [22] Creutz M. Microcanonical Monte Carlo Simulation[J]. Phys. Rev. Lett., 1983, 50: 1411. DOI: [10.1103/PhysRevLett.50.1411](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.50.1411).
- [23] Duane S, Kennedy A D, Pendleton B J, et al. Hybrid Monte Carlo[J]. Phys. Lett. B, 1987, 195: 216-222. DOI: [10.1016/0370-2693\(87\)91197-X](https://doi.org/10.1016/0370-2693(87)91197-X).
- [24] Wick G C. Properties of Bethe-Salpeter Wave Functions[J]. Phys. Rev., 1954, 96: 1124-1134. DOI: [10.1103/PhysRev.96.1124](https://doi.org/10.1103/PhysRev.96.1124).
- [25] Edwards R G, Joó B. The Chroma Software System for Lattice QCD[J]. Nucl. Phys. B Proc. Suppl., 2005, 140: 832. arXiv: [hep-lat/0409003](https://arxiv.org/abs/hep-lat/0409003). DOI: [10.1016/j.nuclphysbps.2004.11.254](https://doi.org/10.1016/j.nuclphysbps.2004.11.254).
- [26] Wilson K G. Quarks and Strings on a Lattice[M]//Zichichi A. New Phenomena in Subnuclear Physics: Part A. Boston, MA: Springer US, 1977: 69-142. DOI: [10.1007/978-1-4613-4208-3_6](https://doi.org/10.1007/978-1-4613-4208-3_6).
- [27] Symanzik K. Continuum limit and improved action in lattice theories: (II). O(N) non-linear sigma model in perturbation theory[J]. Nucl. Phys. B, 1983, 226: 205-227. DOI: [10.1016/0550-3213\(83\)90469-8](https://doi.org/10.1016/0550-3213(83)90469-8).
- [28] Weisz P. Continuum limit improved lattice action for pure Yang-Mills theory (I)[J]. Nucl. Phys. B, 1983, 212: 1-17. DOI: [10.1016/0550-3213\(83\)90595-3](https://doi.org/10.1016/0550-3213(83)90595-3).
- [29] Lüscher M, Weisz P. On-shell improved lattice gauge theories[J]. Commun. Math. Phys., 1985, 97: 59. DOI: [10.1007/BF01206178](https://doi.org/10.1007/BF01206178).
- [30] Lüscher M, Weisz P. Computation of the action for on-shell improved lattice gauge theories at weak coupling[J]. Phys. Lett. B, 1985, 158: 250-254. DOI: [10.1016/0370-2693\(85\)90966-9](https://doi.org/10.1016/0370-2693(85)90966-9).
- [31] Iwasaki Y. Renormalization group analysis of lattice theories and improved lattice action: Two-dimensional non-linear O(N) sigma model[J]. Nucl. Phys. B, 1985, 258: 141-156. DOI: [10.1016/0550-3213\(85\)90606-6](https://doi.org/10.1016/0550-3213(85)90606-6).
- [32] Lepage G P, Mackenzie P B. Viability of lattice perturbation theory[J]. Phys. Rev. D, 1993, 48: 2250-2264. arXiv: [hep-lat/9209022](https://arxiv.org/abs/hep-lat/9209022). DOI: [10.1103/PhysRevD.48.2250](https://doi.org/10.1103/PhysRevD.48.2250).
- [33] Sheikholeslami B, Wohlert R. Improved continuum limit lattice action for QCD with wilson fermions[J]. Nucl. Phys. B, 1985, 259: 572. DOI: [10.1016/0550-3213\(85\)90002-1](https://doi.org/10.1016/0550-3213(85)90002-1).
- [34] Lüscher M, Sint S, Sommer R, et al. Non-perturbative O(a) improvement of lattice QCD[J]. Nucl. Phys. B, 1997, 491: 323-343. arXiv: [hep-lat/9609035](https://arxiv.org/abs/hep-lat/9609035). DOI: [10.1016/S0550-3213\(97\)00080-1](https://doi.org/10.1016/S0550-3213(97)00080-1).
- [35] Nielsen H B, Ninomiya M. Absence of neutrinos on a lattice: (I). Proof by homotopy theory[J]. Nucl. Phys. B, 1981, 185: 20. DOI: [10.1016/0550-3213\(82\)90011-6](https://doi.org/10.1016/0550-3213(82)90011-6).
- [36] Nielsen H B, Ninomiya M. Absence of neutrinos on a lattice: (II). Intuitive topological proof[J]. Nucl. Phys. B, 1981, 193: 173-194. DOI: [10.1016/0550-3213\(81\)90524-1](https://doi.org/10.1016/0550-3213(81)90524-1).
- [37] Nielsen H B, Ninomiya M. A no-go theorem for regularizing chiral fermions[J]. Phys. Lett. B, 1981, 105: 219-223. DOI: [10.1016/0370-2693\(81\)91026-1](https://doi.org/10.1016/0370-2693(81)91026-1).
- [38] Lüscher M. Exact chiral symmetry on the lattice and the Ginsparg-Wilson relation[J]. Phys. Lett. B, 1998, 428: 342-345. arXiv: [hep-lat/9802011](https://arxiv.org/abs/hep-lat/9802011). DOI: [10.1016/S0370-2693\(98\)00423-7](https://doi.org/10.1016/S0370-2693(98)00423-7).

- [39] Ginsparg P H, Wilson K G. A remnant of chiral symmetry on the lattice[J]. Phys. Rev. D, 1982, 25: 2649. DOI: [10.1103/PhysRevD.25.2649](https://doi.org/10.1103/PhysRevD.25.2649).
- [40] Kaplan D B. A method for simulating chiral fermions on the lattice[J]. Phys. Lett. B, 1992, 288: 342-347. arXiv: [hep-lat/9206013](https://arxiv.org/abs/hep-lat/9206013). DOI: [10.1016/0370-2693\(92\)91112-M](https://doi.org/10.1016/0370-2693(92)91112-M).
- [41] Shamir Y. Constraints on the existence of chiral fermions in interacting lattice theories[J]. Phys. Rev. Lett., 1993, 71: 2691-2694. arXiv: [hep-lat/9306023](https://arxiv.org/abs/hep-lat/9306023). DOI: [10.1103/PhysRevLett.71.2691](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.71.2691).
- [42] Shamir Y. Chiral fermions from lattice boundaries[J]. Nucl. Phys. B, 1993, 406: 90-106. arXiv: [hep-lat/9303005](https://arxiv.org/abs/hep-lat/9303005). DOI: [10.1016/0550-3213\(93\)90162-I](https://doi.org/10.1016/0550-3213(93)90162-I).
- [43] Furman V, Shamir Y. Axial symmetries in lattice QCD with Kaplan fermions[J]. Nucl. Phys. B, 1995, 439: 54-78. arXiv: [hep-lat/9405004](https://arxiv.org/abs/hep-lat/9405004). DOI: [10.1016/0550-3213\(95\)00031-M](https://doi.org/10.1016/0550-3213(95)00031-M).
- [44] Narayanan R, Neuberger H. Infinitely many regulator fields for chiral fermions[J]. Phys. Lett. B, 1993, 302: 62-69. arXiv: [hep-lat/9212019](https://arxiv.org/abs/hep-lat/9212019). DOI: [10.1016/0370-2693\(93\)90636-V](https://doi.org/10.1016/0370-2693(93)90636-V).
- [45] Narayanan R, Neuberger H. Chiral determinant as an overlap of two vacua[J]. Nucl. Phys. B, 1994, 412: 574-606. arXiv: [hep-lat/9307006](https://arxiv.org/abs/hep-lat/9307006). DOI: [10.1016/0550-3213\(94\)90393-X](https://doi.org/10.1016/0550-3213(94)90393-X).
- [46] Narayanan R, Neuberger H. Chiral fermions on the lattice[J]. Phys. Rev. Lett., 1993, 71(20): 3251. arXiv: [hep-lat/9308011](https://arxiv.org/abs/hep-lat/9308011). DOI: [10.1103/PhysRevLett.71.3251](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.71.3251).
- [47] Narayanan R, Neuberger H. A construction of lattice chiral gauge theories[J]. Nucl. Phys. B, 1995, 443: 305-385. arXiv: [hep-th/9411108](https://arxiv.org/abs/hep-th/9411108). DOI: [10.1016/0550-3213\(95\)00111-5](https://doi.org/10.1016/0550-3213(95)00111-5).
- [48] Neuberger H. Exactly massless quarks on the lattice[J]. Phys. Lett. B, 1998, 417: 141-144. arXiv: [hep-lat/9707022](https://arxiv.org/abs/hep-lat/9707022). DOI: [10.1016/S0370-2693\(97\)01368-3](https://doi.org/10.1016/S0370-2693(97)01368-3).
- [49] Neuberger H. More about exactly massless quarks on the lattice[J]. Phys. Lett. B, 1998, 427: 353-355. arXiv: [hep-lat/9801031](https://arxiv.org/abs/hep-lat/9801031). DOI: [10.1016/S0370-2693\(98\)00355-4](https://doi.org/10.1016/S0370-2693(98)00355-4).
- [50] Bietenholz W, Wiese U. A Perturbative construction of lattice chiral fermions[J]. Phys. Lett. B, 1996, 378: 222-226. arXiv: [hep-lat/9503022](https://arxiv.org/abs/hep-lat/9503022). DOI: [10.1016/0370-2693\(96\)00381-4](https://doi.org/10.1016/0370-2693(96)00381-4).
- [51] Bietenholz W, Wiese U J. Perfect lattice actions for quarks and gluons[J]. Nucl. Phys. B, 1996, 464: 319-352. arXiv: [hep-lat/9510026](https://arxiv.org/abs/hep-lat/9510026). DOI: [10.1016/0550-3213\(95\)00678-8](https://doi.org/10.1016/0550-3213(95)00678-8).
- [52] Kogut J B, Susskind L. Hamiltonian formulation of Wilson's lattice gauge theories[J]. Phys. Rev. D, 1975, 11: 395-408. DOI: [10.1103/PhysRevD.11.395](https://doi.org/10.1103/PhysRevD.11.395).
- [53] Banks T, Susskind L, Kogut J B. Strong-coupling calculations of lattice gauge theories: (1 + 1)-dimensional exercises[J]. Phys. Rev. D, 1976, 13: 1043. DOI: [10.1103/PhysRevD.13.1043](https://doi.org/10.1103/PhysRevD.13.1043).
- [54] Bernard C. Staggered chiral perturbation theory and the fourth-root trick[J]. Phys. Rev. D, 2006, 73: 114503. arXiv: [hep-lat/0603011](https://arxiv.org/abs/hep-lat/0603011). DOI: [10.1103/PhysRevD.73.114503](https://doi.org/10.1103/PhysRevD.73.114503).
- [55] Durr S, et al. Ab Initio Determination of Light Hadron Masses[J]. Science, 2008, 322: 1224-1227. arXiv: [0906.3599 \[hep-lat\]](https://arxiv.org/abs/0906.3599). DOI: [10.1126/science.1163233](https://doi.org/10.1126/science.1163233).
- [56] Borsanyi S, et al. Calculation of the axion mass based on high-temperature lattice quantum chromodynamics[J]. Nature, 2016, 539(7627): 69-71. arXiv: [1606.07494 \[hep-lat\]](https://arxiv.org/abs/1606.07494). DOI: [10.1038/nature20115](https://doi.org/10.1038/nature20115).
- [57] Chang C C, et al. A per-cent-level determination of the nucleon axial coupling from quantum chromodynamics[J]. Nature, 2018, 558(7708): 91-94. arXiv: [1805.12130 \[hep-lat\]](https://arxiv.org/abs/1805.12130). DOI: [10.1038/s41586-018-0161-8](https://doi.org/10.1038/s41586-018-0161-8).
- [58] Borsanyi S, et al. Leading hadronic contribution to the muon magnetic moment from lattice QCD[J]. Nature, 2021, 593(7857): 51-55. arXiv: [2002.12347 \[hep-lat\]](https://arxiv.org/abs/2002.12347). DOI: [10.1038/s41586-021-03418-1](https://doi.org/10.1038/s41586-021-03418-1).

- [59] Klassen T R. The anisotropic Wilson gauge action[J]. Nucl. Phys. B, 1998, 533: 557-575. arXiv: [hep-lat/9803010](#). DOI: [10.1016/S0550-3213\(98\)00510-0](#).
- [60] Klassen T R. Non-perturbative improvement of the anisotropic Wilson QCD action[J]. Nucl. Phys. B Proc. Suppl., 1999, 73: 918-920. arXiv: [hep-lat/9809174](#). DOI: [10.1016/S0920-5632\(99\)85244-X](#).
- [61] Alford M G, Klassen T R, Lepage G P. Towards highly improved quark actions[J]. Nucl. Phys. B Proc. Suppl., 1997, 53: 861-866. arXiv: [hep-lat/9608113](#). DOI: [10.1016/S0920-5632\(96\)00803-1](#).
- [62] Alford M G, Klassen T R, Lepage G P. Improving lattice quark actions[J]. Nucl. Phys. B, 1997, 496: 377-407. arXiv: [hep-lat/9611010](#). DOI: [10.1016/S0550-3213\(97\)00249-6](#).
- [63] Chen P. Heavy quarks on anisotropic lattices: The charmonium spectrum[J]. Phys. Rev. D, 2001, 64: 034509. arXiv: [hep-lat/0006019](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.64.034509](#).
- [64] Harada J, Kronfeld A S, Matsufuru H, et al. O(a)-improved quark action on anisotropic lattices and perturbative renormalization of heavy-light currents[J]. Phys. Rev. D, 2001, 64: 074501. arXiv: [hep-lat/0103026](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.64.074501](#).
- [65] Okamoto M, et al. Charmonium spectrum from quenched anisotropic lattice QCD[J]. Phys. Rev. D, 2002, 65: 094508. arXiv: [hep-lat/0112020](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.65.094508](#).
- [66] Morningstar C. Improved gluonic actions on anisotropic lattices[J]. Nucl. Phys. B Proc. Suppl., 1997, 53: 914-916. arXiv: [hep-lat/9608019](#). DOI: [10.1016/S0920-5632\(96\)00816-X](#).
- [67] Morningstar C J, Peardon M J. Efficient glueball simulations on anisotropic lattices[J]. Phys. Rev. D, 1997, 56: 4043-4061. arXiv: [hep-lat/9704011](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.56.4043](#).
- [68] Morningstar C, Peardon M J. The glueball spectrum from novel improved actions[J]. Nucl. Phys. B Proc. Suppl., 2000, 83: 887-889. arXiv: [hep-lat/9911003](#). DOI: [10.1016/S0920-5632\(00\)00392-3](#).
- [69] Chen Y, et al. Glueball spectrum and matrix elements on anisotropic lattices[J]. Phys. Rev. D, 2006, 73: 014516. arXiv: [hep-lat/0510074](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.73.014516](#).
- [70] Dudek J J, Edwards R G, Mathur N, et al. Charmonium excited state spectrum in lattice QCD[J]. Phys. Rev. D, 2008, 77: 034501. arXiv: [0707.4162 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.77.034501](#).
- [71] Albanese M, et al. Glueball masses and string tension in lattice QCD[J]. Phys. Lett. B, 1987, 192: 163-169. DOI: [10.1016/0370-2693\(87\)91160-9](#).
- [72] Blum T, Detar C E, Gottlieb S A, et al. Improving flavor symmetry in the Kogut-Susskind hadron spectrum[J]. Phys. Rev. D, 1997, 55: R1133-R1137. arXiv: [hep-lat/9609036](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.55.R1133](#).
- [73] Orginos K, Toussaint D, Sugar R L. Variants of fattening and flavor symmetry restoration[J]. Phys. Rev. D, 1999, 60: 054503. arXiv: [hep-lat/9903032](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.60.054503](#).
- [74] Hasenfratz A, Knechtli F. Flavor symmetry and the static potential with hypercubic blocking[J]. Phys. Rev. D, 2001, 64: 034504. arXiv: [hep-lat/0103029](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.64.034504](#).
- [75] Aoki Y, Fodor Z, Katz S D, et al. The equation of state in lattice QCD: with physical quark masses towards the continuum limit[J]. JHEP, 2006, 01: 089. arXiv: [hep-lat/0510084](#). DOI: [10.1088/1126-6708/2006/01/089](#).

- [76] Follana E, Mason Q, Davies C, et al. Highly improved staggered quarks on the lattice with applications to charm physics[J]. Phys. Rev. D, 2007, 75: 054502. arXiv: [hep-lat/0610092](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.75.054502](#).
- [77] DeGrand T A, Hasenfratz A, Kovacs T G. Optimizing the chiral properties of lattice fermion actions[J]., 1998. arXiv: [hep-lat/9807002](#).
- [78] Bernard C W, DeGrand T A. Perturbation theory for fat link fermion actions[J]. Nucl. Phys. B Proc. Suppl., 2000, 83: 845-847. arXiv: [hep-lat/9909083](#). DOI: [10.1016/S0920-5632\(00\)91822-X](#).
- [79] Stephenson M, Detar C E, DeGrand T A, et al. Scaling and eigenmode tests of the improved fat clover action[J]. Phys. Rev. D, 2001, 63: 034501. arXiv: [hep-lat/9910023](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.63.034501](#).
- [80] Zanolini J M, Bilson-Thompson S O, Bonnet F D R, et al. Hadron masses from novel fat link fermion actions[J]. Phys. Rev. D, 2002, 65: 074507. arXiv: [hep-lat/0110216](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.65.074507](#).
- [81] DeGrand T A, Hasenfratz A, Kovacs T G. Improving the chiral properties of lattice fermions[J]. Phys. Rev. D, 2003, 67: 054501. arXiv: [hep-lat/0211006](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.67.054501](#).
- [82] Hasenfratz A, Hoffmann R, Schaefer S. Hypercubic smeared links for dynamical fermions[J]. JHEP, 2007, 05: 029. arXiv: [hep-lat/0702028](#). DOI: [10.1088/1126-6708/2007/05/029](#).
- [83] Morningstar C, Peardon M J. Analytic smearing of SU(3) link variables in lattice QCD[J]. Phys. Rev. D, 2004, 69: 054501. arXiv: [hep-lat/0311018](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.69.054501](#).
- [84] Durr S, et al. Scaling study of dynamical smeared-link clover fermions[J]. Phys. Rev. D, 2009, 79: 014501. arXiv: [0802.2706 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.79.014501](#).
- [85] Capitani S, Durr S, Hoelbling C. Rationale for UV-filtered clover fermions[J]. JHEP, 2006, 11: 028. arXiv: [hep-lat/0607006](#). DOI: [10.1088/1126-6708/2006/11/028](#).
- [86] DeGrand T A, Loft R D. Gaussian shell model trial wave functions for lattice QCD spectroscopy[J]., 1991.
- [87] Peardon M, Bulava J, Foley J, et al. Novel quark-field creation operator construction for hadronic physics in lattice QCD[J]. Phys. Rev. D, 2009, 80: 054506. arXiv: [0905.2160 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.80.054506](#).
- [88] Saad Y. Iterative Methods for Sparse Linear Systems[M]. Second. [S.l.]: Society for Industrial, 2003. DOI: [10.1137/1.9780898718003](#).
- [89] Hestenes M R, Stiefel E, et al. Methods of conjugate gradients for solving linear systems[J]. Journal of research of the National Bureau of Standards, 1952, 49(6): 409-436. DOI: [10.6028/jres.049.044.](#)
- [90] Paige C C, Saunders M A. Solution of Sparse Indefinite Systems of Linear Equations[J]. SIAM Journal on Numerical Analysis, 1975, 12(4): 617-629. DOI: [10.1137/0712047](#).
- [91] Fletcher R. Conjugate gradient methods for indefinite systems[C]//Watson G A. Numerical Analysis. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1976: 73-89. DOI: [10.1007/BFb0080116](#).
- [92] Van der Vorst H A. Bi-CGSTAB: A Fast and Smoothly Converging Variant of Bi-CG for the Solution of Nonsymmetric Linear Systems[J]. SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing, 1992, 13(2): 631-644. DOI: [10.1137/0913035](#).

- [93] Shewchuk J R. An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain[R/OL]. USA: Carnegie Mellon University, 1994. <https://dl.acm.org/doi/10.5555/865018>.
- [94] Frommer A, Hannemann V, Nockel B, et al. Accelerating Wilson fermion matrix inversions by means of the stabilized biconjugate gradient algorithm[J]. Int. J. Mod. Phys. C, 1994, 5: 1073-1088. arXiv: [hep-lat/9404013](https://arxiv.org/abs/hep-lat/9404013). DOI: [10.1142/S012918319400115X](https://doi.org/10.1142/S012918319400115X).
- [95] Brandt A. Multi-level adaptive solutions to boundary-value problems[J]. Mathematics of computation, 1977, 31(138): 333-390.
- [96] Joó B. Mg proto: a prototype multi-grid library for QCD[CP/OL]. 2018. https://github.com/JeffersonLab/mg_proto.
- [97] Clark M A, Joó B, Strelchenko A, et al. Accelerating Lattice QCD Multigrid on GPUs Using Fine-Grained Parallelization[C]//SC '16: Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis. Salt Lake City, Utah: IEEE Press, 2016. arXiv: [1612.07873](https://arxiv.org/abs/1612.07873) [[hep-lat](https://arxiv.org/abs/hep-lat)]. DOI: [10.5555/3014904.3014995](https://doi.org/10.5555/3014904.3014995).
- [98] Boyle P, Yamaguchi A, Cossu G, et al. Grid: A next generation data parallel C++ QCD library[J]., 2015. arXiv: [1512.03487](https://arxiv.org/abs/1512.03487) [[hep-lat](https://arxiv.org/abs/hep-lat)].
- [99] Brannick J, Brower R C, Clark M A, et al. Adaptive Multigrid Algorithm for Lattice QCD[J]. Phys. Rev. Lett., 2008, 100: 041601. arXiv: [0707.4018](https://arxiv.org/abs/0707.4018) [[hep-lat](https://arxiv.org/abs/hep-lat)]. DOI: [10.1103/PhysRevLett.100.041601](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.041601).
- [100] Babich R, Brannick J, Brower R C, et al. Adaptive Multigrid Algorithm for the Lattice Wilson-Dirac Operator[J]. Phys. Rev. Lett., 2010, 105: 201602. arXiv: [1005.3043](https://arxiv.org/abs/1005.3043) [[hep-lat](https://arxiv.org/abs/hep-lat)]. DOI: [10.1103/PhysRevLett.105.201602](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.105.201602).
- [101] Osborn J C, Babich R, Brannick J, et al. Multigrid solver for clover fermions[J]. PoS, 2010, LATTICE2010: 037. arXiv: [1011.2775](https://arxiv.org/abs/1011.2775) [[hep-lat](https://arxiv.org/abs/hep-lat)]. DOI: [10.22323/1.105.0037](https://doi.org/10.22323/1.105.0037).
- [102] Cohen S D, Brower R C, Clark M A, et al. Multigrid Algorithms for Domain-Wall Fermions[J]. PoS, 2011, LATTICE2011: 030. arXiv: [1205.2933](https://arxiv.org/abs/1205.2933) [[hep-lat](https://arxiv.org/abs/hep-lat)]. DOI: [10.22323/1.139.0030](https://doi.org/10.22323/1.139.0030).
- [103] Brower R C, Clark M A, Strelchenko A, et al. Multigrid algorithm for staggered lattice fermions[J]. Phys. Rev. D, 2018, 97(11): 114513. arXiv: [1801.07823](https://arxiv.org/abs/1801.07823) [[hep-lat](https://arxiv.org/abs/hep-lat)]. DOI: [10.1103/PhysRevD.97.114513](https://doi.org/10.1103/PhysRevD.97.114513).
- [104] Oyanagi Y. An incomplete LDU decomposition of lattice fermions and its application to conjugate residual methods[J]. Comput. Phys. Commun., 1986, 42(3): 333-343. DOI: [10.1016/0010-4655\(86\)90003-2](https://doi.org/10.1016/0010-4655(86)90003-2).
- [105] Rossi P, Davies C T H, Lepage G P. A comparison of a variety of matrix inversion algorithms for Wilson fermions on the lattice[J]. Nucl. Phys. B, 1988, 297: 287-314. DOI: [10.1016/0550-3213\(88\)90021-1](https://doi.org/10.1016/0550-3213(88)90021-1).
- [106] DeGrand T A. A conditioning technique for matrix inversion for Wilson fermions[J]. Comput. Phys. Commun., 1988, 52: 161-164. DOI: [10.1016/0010-4655\(88\)90180-4](https://doi.org/10.1016/0010-4655(88)90180-4).
- [107] DeGrand T A, Rossi P. Conditioning techniques for dynamical fermions[J]. Comput. Phys. Commun., 1990, 60: 211-214. DOI: [10.1016/0010-4655\(90\)90006-M](https://doi.org/10.1016/0010-4655(90)90006-M).
- [108] Lüscher M. Volume dependence of the energy spectrum in massive quantum field theories I. Stable particle states[J]. Commun. Math. Phys., 1986, 104: 177. DOI: [10.1007/BF01211589](https://doi.org/10.1007/BF01211589).
- [109] Lüscher M. Volume dependence of the energy spectrum in massive quantum field theories II. Scattering states[J]. Commun. Math. Phys., 1986, 105: 153-188. DOI: [10.1007/BF01211097](https://doi.org/10.1007/BF01211097).

- [110] Aoki S, et al. Physical point simulation in $2 + 1$ flavor lattice QCD[J]. Phys. Rev. D, 2010, 81: 074503. arXiv: [0911.2561 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.81.074503](#).
- [111] Durr S, Fodor Z, Hoelbling C, et al. Lattice QCD at the physical point: simulation and analysis details[J]. JHEP, 2011, 08: 148. arXiv: [1011.2711 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1007/JHEP08\(2011\)148](#).
- [112] Sun W, Gui L C, Chen Y, et al. Glueball spectrum from $N_f = 2$ lattice QCD study on anisotropic lattices[J]. Chin. Phys. C, 2018, 42(9): 093103. arXiv: [1702.08174 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1088/1674-1137/42/9/093103](#).
- [113] Edwards R G, Joó B, Lin H W. Tuning for three flavors of anisotropic clover fermions with stout-link smearing[J]. Phys. Rev. D, 2008, 78: 054501. arXiv: [0803.3960 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.78.054501](#).
- [114] Cabibbo N, Marinari E. A new method for updating SU(N) matrices in computer simulations of gauge theories[J]. Phys. Lett. B, 1982, 119: 387-390. DOI: [10.1016/0370-2693\(82\)90696-7](#).
- [115] Adler S L. Over-relaxation method for the Monte Carlo evaluation of the partition function for multiquadratic actions[J]. Phys. Rev. D, 1981, 23: 2901. DOI: [10.1103/PhysRevD.23.2901](#).
- [116] Whitmer C. Over-relaxation methods for Monte Carlo simulations of quadratic and multi-quadratic actions[J]. Phys. Rev. D, 1984, 29: 306-311. DOI: [10.1103/PhysRevD.29.306](#).
- [117] Creutz M. Overrelaxation and Monte Carlo simulation[J]. Phys. Rev. D, 1987, 36: 515. DOI: [10.1103/PhysRevD.36.515](#).
- [118] Petronzio R, Vicari E. An overrelaxed Monte Carlo algorithm for SU (3) lattice gauge theories[J]. Phys. Lett. B, 1990, 248: 159-162. DOI: [10.1016/0370-2693\(90\)90032-2](#).
- [119] Metropolis N, Rosenbluth A W, Rosenbluth M N, et al. Equation of state calculations by fast computing machines[J]. The journal of chemical physics, 1953, 21(6): 1087-1092. DOI: [10.1063/1.1699114](#).
- [120] Hastings W K. Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications[J]. Biometrika, 1970, 57(1): 97-109. DOI: [10.1093/biomet/57.1.97](#).
- [121] Gottlieb S A, Liu W, Toussaint D, et al. Hybrid-molecular-dynamics algorithms for the numerical simulation of quantum chromodynamics[J]. Phys. Rev. D, 1987, 35: 2531-2542. DOI: [10.1103/PhysRevD.35.2531](#).
- [122] Omelyan I, Mryglod I, Folk R. Symplectic analytically integrable decomposition algorithms: classification, derivation, and application to molecular dynamics, quantum and celestial mechanics simulations[J]. Computer Physics Communications, 2003, 151(3): 272-314. DOI: [10.1016/S0010-4655\(02\)00754-3](#).
- [123] Swope W C, Andersen H C, Berens P H, et al. A computer simulation method for the calculation of equilibrium constants for the formation of physical clusters of molecules: Application to small water clusters[J]. The Journal of Chemical Physics, 1982, 76(1): 637-649. DOI: [10.1063/1.442716](#).
- [124] Tuckerman M, Berne B J, Martyna G J. Reversible multiple time scale molecular dynamics[J]. The Journal of Chemical Physics, 1992, 97(3): 1990-2001. DOI: [10.1063/1.463137](#).
- [125] Kennedy A D, Clark M A. Speeding up HMC with better integrators[J]. PoS, 2007, LATTICE2007: 038. arXiv: [0710.3611 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.22323/1.042.0038](#).
- [126] Clark M A, Kennedy A D, Silva P J. Tuning HMC using Poisson brackets[J]. PoS, 2008, LATTICE2008: 041. arXiv: [0810.1315 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.22323/1.066.0041](#).

- [127] Kennedy A D, Clark M A, Silva P J. Force Gradient Integrators[J]. PoS, 2009, LAT2009: 021. arXiv: [0910.2950 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.22323/1.091.0021](#).
- [128] Clark M A, Joo B, Kennedy A D, et al. Better HMC integrators for dynamical simulations[J]. PoS, 2010, LATTICE2010: 323. arXiv: [1011.0230 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.22323/1.105.0323](#).
- [129] Clark M A, Joo B, Kennedy A D, et al. Improving dynamical lattice QCD simulations through integrator tuning using Poisson brackets and a force-gradient integrator[J]. Phys. Rev. D, 2011, 84: 071502. arXiv: [1108.1828 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.84.071502](#).
- [130] Yin H, Mawhinney R D. Improving DWF Simulations: the Force Gradient Integrator and the Möbius Accelerated DWF Solver[J]. PoS, 2011, LATTICE2011: 051. arXiv: [1111.5059 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.22323/1.139.0051](#).
- [131] Guha A, Lee S C. Stochastic quantization of matrix and lattice gauge models[J]. Phys. Rev. D, 1983, 27: 2412. DOI: [10.1103/PhysRevD.27.2412](#).
- [132] Duane S, Kenway R, Pendleton B J, et al. Acceleration of gauge field dynamics[J]. Phys. Lett. B, 1986, 176: 143. DOI: [10.1016/0370-2693\(86\)90940-8](#).
- [133] Luo X Q. Molecular dynamics for full QCD simulations with an improved action[J]. Comput. Phys. Commun., 1996, 94: 119-127. arXiv: [hep-lat/9603021](#). DOI: [10.1016/0010-4655\(95\)00128-X](#).
- [134] Hasenbusch M, Jansen K. Speeding up the Hybrid-Monte-Carlo algorithm for dynamical fermions[J]. Nucl. Phys. B Proc. Suppl., 2002, 106: 1076-1078. arXiv: [hep-lat/0110180](#). DOI: [10.1016/S0920-5632\(01\)01933-8](#).
- [135] Hasenbusch M, Jansen K. Speeding up lattice QCD simulations with clover-improved Wilson fermions[J]. Nucl. Phys. B, 2003, 659: 299-320. arXiv: [hep-lat/0211042](#). DOI: [10.1016/S0550-3213\(03\)00227-X](#).
- [136] Hasenbusch M, Jansen K. Speeding up the HMC: QCD with clover-improved wilson fermions[J]. Nucl. Phys. B Proc. Suppl., 2003, 119: 982-984. arXiv: [hep-lat/0210036](#). DOI: [10.1016/S0920-5632\(03\)01737-7](#).
- [137] Aoki S, Burkhalter R, Fukugita M, et al. Polynomial hybrid Monte Carlo algorithm for lattice QCD with an odd number of flavors[J]. Phys. Rev. D, 2002, 65: 094507. arXiv: [hep-lat/0112051](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.65.094507](#).
- [138] Lüscher M. A new approach to the problem of dynamical quarks in numerical simulations of lattice QCD[J]. Nucl. Phys. B, 1994, 418: 637-648. arXiv: [hep-lat/9311007](#). DOI: [10.1016/0550-3213\(94\)90533-9](#).
- [139] De Forcrand P, Takaishi T. Fast fermion Monte Carlo[J]. Nucl. Phys. B Proc. Suppl., 1997, 53: 968-970. arXiv: [hep-lat/9608093](#). DOI: [10.1016/S0920-5632\(96\)00829-8](#).
- [140] Frezzotti R, Jansen K. A polynomial hybrid Monte Carlo algorithm[J]. Phys. Lett. B, 1997, 402: 328-334. arXiv: [hep-lat/9702016](#). DOI: [10.1016/S0370-2693\(97\)00475-9](#).
- [141] Frezzotti R, Jansen K. The PHMC algorithm for simulations of dynamical fermions I. Description and properties[J]. Nucl. Phys. B, 1999, 555: 395-431. arXiv: [hep-lat/9808011](#). DOI: [10.1016/S0550-3213\(99\)00321-1](#).
- [142] Frezzotti R, Jansen K. The PHMC algorithm for simulations of dynamical fermions II. Performance analysis[J]. Nucl. Phys. B, 1999, 555: 432-453. arXiv: [hep-lat/9808038](#). DOI: [10.1016/S0550-3213\(99\)00322-3](#).

- [143] Borici A, de Forcrand P. Systematic errors of Lüscher's fermion method and its extensions[J]. Nucl. Phys. B, 1995, 454: 645-662. arXiv: [hep-lat/9505021](#). DOI: [10.1016/0550-3213\(95\)00429-V](#).
- [144] Alexandrou C, Borici A, Feo A, et al. Deconfinement phase transition in one-flavor QCD[J]. Phys. Rev. D, 1999, 60: 034504. arXiv: [hep-lat/9811028](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.60.034504](#).
- [145] Takaishi T, de Forcrand P. Odd flavor hybrid Monte Carlo algorithm for lattice QCD[J]. Int. J. Mod. Phys. C, 2002, 13: 343-366. arXiv: [hep-lat/0108012](#). DOI: [10.1142/S0129183102003152](#).
- [146] Kennedy A D, Kuti J. Noise without Noise: A New Monte Carlo Method[J]. Phys. Rev. Lett., 1985, 54: 2473-2476. DOI: [10.1103/PhysRevLett.54.2473](#).
- [147] Kennedy A D, Horvath I, Sint S. A new exact method for dynamical fermion computations with non-local actions[J]. Nucl. Phys. B Proc. Suppl., 1999, 73: 834-836. arXiv: [hep-lat/9809092](#). DOI: [10.1016/S0920-5632\(99\)85217-7](#).
- [148] Clark M A, Kennedy A D. The RHMC algorithm for 2 flavours of dynamical staggered fermions[J]. Nucl. Phys. B Proc. Suppl., 2004, 129: 850-852. arXiv: [hep-lat/0309084](#). DOI: [10.1016/S0920-5632\(03\)02732-4](#).
- [149] Clark M A, Kennedy A D. Accelerating dynamical fermion computations using the rational hybrid Monte Carlo (RHMC) algorithm with multiple pseudofermion fields[J]. Phys. Rev. Lett., 2007, 98: 051601. arXiv: [hep-lat/0608015](#). DOI: [10.1103/PhysRevLett.98.051601](#).
- [150] Clark M A, Kennedy A D. Accelerating Staggered Fermion Dynamics with the Rational Hybrid Monte Carlo (RHMC) Algorithm[J]. Phys. Rev. D, 2007, 75: 011502. arXiv: [hep-lat/0610047](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.75.011502](#).
- [151] Remez E И. General computational methods of Chebyshev approximation: The problems with linear real parameters[M]. [S.l.]: US Atomic Energy Commission, Division of Technical Information, 1962.
- [152] Frommer A, Nockel B, Gusken S, et al. Many masses on one stroke: Economic computation of quark propagators[J]. Int. J. Mod. Phys. C, 1995, 6: 627-638. arXiv: [hep-lat/9504020](#). DOI: [10.1142/S0129183195000538](#).
- [153] Johnson R C. Angular momentum on a lattice[J]. Phys. Lett. B, 1982, 114: 147-151. DOI: [10.1016/0370-2693\(82\)90134-4](#).
- [154] Basak S, Edwards R, Fleming G T, et al. Clebsch-Gordan construction of lattice interpolated fields for excited baryons[J]. Phys. Rev. D, 2005, 72: 074501. arXiv: [hep-lat/0508018](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.72.074501](#).
- [155] Moore D C, Fleming G T. Angular momentum on the lattice: The case of nonzero linear momentum[J]. Phys. Rev. D, 2006, 73: 014504. arXiv: [hep-lat/0507018](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.73.014504](#).
- [156] Thomas C E, Edwards R G, Dudek J J. Helicity operators for mesons in flight on the lattice[J]. Phys. Rev. D, 2012, 85: 014507. arXiv: [1107.1930 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.85.014507](#).
- [157] Michael C. Adjoint sources in lattice gauge theory[J]. Nucl. Phys. B, 1985, 259: 58-76. DOI: [10.1016/0550-3213\(85\)90297-4](#).
- [158] Lüscher M, Wolff U. How to calculate the elastic scattering matrix in two-dimensional quantum field theories by numerical simulation[J]. Nucl. Phys. B, 1990, 339: 222-252. DOI: [10.1016/0550-3213\(90\)90540-T](#).

- [159] Blossier B, Della Morte M, von Hippel G, et al. On the generalized eigenvalue method for energies and matrix elements in lattice field theory[J]. JHEP, 2009, 04: 094. arXiv: [0902.1265 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1088/1126-6708/2009/04/094](#).
- [160] Mahbub M S, O. Cais A, Kamleh W, et al. Isolating excited states of the nucleon in lattice QCD[J]. Phys. Rev. D, 2009, 80: 054507. arXiv: [0905.3616 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.80.054507](#).
- [161] Davies C T H, Follana E, Kendall I D, et al. Precise determination of the lattice spacing in full lattice QCD[J]. Phys. Rev. D, 2010, 81: 034506. arXiv: [0910.1229 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.81.034506](#).
- [162] Abdel-Rehim A, et al. First physics results at the physical pion mass from $N_f = 2$ Wilson twisted mass fermions at maximal twist[J]. Phys. Rev. D, 2017, 95(9): 094515. arXiv: [1507.05068 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.95.094515](#).
- [163] Meng G Z, et al. Low-energy $D^{*+}\bar{D}_1^0$ scattering and the resonancelike structure $Z^+(4430)$ [J]. Phys. Rev. D, 2009, 80: 034503. arXiv: [0905.0752 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.80.034503](#).
- [164] Chen S, Shi C, Chen Y, et al. $T_{cc}^+(3875)$ Relevant DD^* scattering from $N_f = 2$ lattice QCD[J]. Phys. Lett. B, 2022, 833: 137391. arXiv: [2206.06185 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1016/j.physletb.2022.137391](#).
- [165] Goodman J, Weare J. Ensemble samplers with affine invariance[J]. Communications in Applied Mathematics and Computational Science, 2010, 5(1): 65-80. DOI: [10.2140/camcos.2010.5.65](#).
- [166] Behnel S, Bradshaw R, Citro C, et al. Cython: The Best of Both Worlds[J]. Computing in Science & Engineering, 2011, 13(2): 31-39. DOI: [10.1109/MCSE.2010.118](#).
- [167] Clark M A, Babich R, Barros K, et al. Solving lattice QCD systems of equations using mixed precision solvers on GPUs[J]. Comput. Phys. Commun., 2010, 181: 1517-1528. arXiv: [0911.3191 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1016/j.cpc.2010.05.002](#).
- [168] Babich R, Clark M A, Joó B, et al. Scaling Lattice QCD beyond 100 GPUs[C]//SC '11: Proceedings of 2011 International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis. Seattle, Washington: Association for Computing Machinery, 2011. arXiv: [0911.3191 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1145/2063384.2063478](#).
- [169] Van Rossum G, Drake F L. Python 3 Reference Manual[M]. Scotts Valley, CA: CreateSpace, 2009.
- [170] Harris C R, Millman K J, van der Walt S J, et al. Array programming with NumPy[J/OL]. Nature, 2020, 585(7825): 357-362. <https://doi.org/10.1038/s41586-020-2649-2>. DOI: [10.1038/s41586-020-2649-2](#).
- [171] Virtanen P, Gommers R, Oliphant T E, et al. SciPy 1.0: Fundamental Algorithms for Scientific Computing in Python[J]. Nature Methods, 2020, 17: 261-272. DOI: [10.1038/s41592-019-0686-2](#).
- [172] NVIDIA. CUDA [CP/OL]. <https://developer.nvidia.com/cuda-toolkit>.
- [173] Okuta R, Unno Y, Nishino D, et al. CuPy: A NumPy-Compatible Library for NVIDIA GPU Calculations[C/OL]//Proceedings of Workshop on Machine Learning Systems (LearningSys) in The Thirty-first Annual Conference on Neural Information Processing Systems (NIPS). [S.l. : s.n.], 2017. http://learningsys.org/nips17/assets/papers/paper_16.pdf.
- [174] Dalcin L, Fang Y L L. Mpi4py: Status Update After 12 Years of Development[J]. Computing in Science & Engineering, 2021, 23(4): 47-54. DOI: [10.1109/MCSE.2021.3083216](#).

- [175] Schaefer S, Sommer R, Virota F. Critical slowing down and error analysis in lattice QCD simulations[J]. Nucl. Phys. B, 2011, 845: 93-119. arXiv: [1009.5228 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1016/j.nuclphysb.2010.11.020](#).
- [176] Yamamoto S, Bacchio S, Finkenrath J. Running HMC Simulation with Python via QUDA[J]. PoS, 2023, LATTICE2022: 346. arXiv: [2212.06657 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.22323/1.430.0346](#).
- [177] Chen F, Jiang X, Chen Y, et al. 1^{--} Hybrid meson in J/ψ radiative decays from lattice QCD[J]. Phys. Rev. D, 2023, 107(5): 054511. arXiv: [2207.04694 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.107.054511](#).
- [178] Dudek J J, Edwards R G, Richards D G. Radiative transitions in charmonium from lattice QCD[J]. Phys. Rev. D, 2006, 73: 074507. arXiv: [hep-ph/0601137](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.73.074507](#).
- [179] Yang Y B, Chen Y, Gui L C, et al. Lattice study on η_{c2} and $X(3872)$ [J]. Phys. Rev. D, 2013, 87(1): 014501. arXiv: [1206.2086 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.87.014501](#).
- [180] Kogut J B, Susskind L. How quark confinement solves the $\eta \rightarrow 3\pi$ problem[J]. Phys. Rev. D, 1975, 11: 3594. DOI: [10.1103/PhysRevD.11.3594](#).
- [181] Witten E. Instantons, the quark model, and the $1/N$ expansion[J]. Nucl. Phys. B, 1979, 149: 285-320. DOI: [10.1016/0550-3213\(79\)90243-8](#).
- [182] Veneziano G. U(1) without instantons[J]. Nucl. Phys. B, 1979, 159: 213-224. DOI: [10.1016/0550-3213\(79\)90332-8](#).
- [183] Cichy K, Garcia-Ramos E, Jansen K, et al. Non-perturbative test of the Witten-Veneziano formula from lattice QCD[J]. JHEP, 2015, 09: 020. arXiv: [1504.07954 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1007/JHEP09\(2015\)020](#).
- [184] Ambrosino F, et al. Measurement of the pseudoscalar mixing angle and η' gluonium content with the KLOE detector[J]. Phys. Lett. B, 2007, 648: 267-273. arXiv: [hep-ex/0612029](#). DOI: [10.1016/j.physletb.2007.03.032](#).
- [185] Escribano R, Nadal J. On the gluon content of the η and η' mesons[J]. JHEP, 2007, 05: 006. arXiv: [hep-ph/0703187](#). DOI: [10.1088/1126-6708/2007/05/006](#).
- [186] Li G, Zhao Q, Chang C H. Decays of J/ψ and ψ' into vector and pseudoscalar mesons and the pseudoscalar glueball- $q\bar{q}$ mixing[J]. J. Phys. G, 2008, 35: 055002. arXiv: [hep-ph/0701020](#). DOI: [10.1088/0954-3899/35/5/055002](#).
- [187] Cheng H Y, Li H n, Liu K F. Pseudoscalar glueball mass from η - η' - G mixing[J]. Phys. Rev. D, 2009, 79: 014024. arXiv: [0811.2577 \[hep-ph\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.79.014024](#).
- [188] He S, Huang M, Yan Q S. Pseudoscalar glueball in a chiral Lagrangian model with instanton effect[J]. Phys. Rev. D, 2010, 81: 014003. arXiv: [0903.5032 \[hep-ph\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.81.014003](#).
- [189] Li B A. Chiral field theory of 0^{--} glueball[J]. Phys. Rev. D, 2010, 81: 114002. arXiv: [0912.2323 \[hep-ph\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.81.114002](#).
- [190] Tsai Y D, Li H n, Zhao Q. η_c Mixing effects on charmonium and B meson decays[J]. Phys. Rev. D, 2012, 85: 034002. arXiv: [1110.6235 \[hep-ph\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.85.034002](#).
- [191] Chowdhury A, Harindranath A, Maiti J. Correlation and localization properties of topological charge density and the pseudoscalar glueball mass in SU(3) lattice Yang-Mills theory[J]. Phys. Rev. D, 2015, 91(7): 074507. arXiv: [1409.6459 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.91.074507](#).

- [192] Richards C M, Irving A C, Gregory E B, et al. Glueball mass measurements from improved staggered fermion simulations[J]. Phys. Rev. D, 2010, 82: 034501. arXiv: [1005.2473 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.82.034501](#).
- [193] Gregory E, Irving A, Lucini B, et al. Towards the glueball spectrum from unquenched lattice QCD[J]. JHEP, 2012, 10: 170. arXiv: [1208.1858 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1007/JHEP10\(2012\)170](#).
- [194] Wu J J, Liu X H, Zhao Q, et al. Puzzle of Anomalously Large Isospin Violations in $\eta(1405/1475) \rightarrow 3\pi$ [J]. Phys. Rev. Lett., 2012, 108: 081803. arXiv: [1108.3772 \[hep-ph\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevLett.108.081803](#).
- [195] Mathieu V, Vento V. Pseudoscalar glueball and $\eta - \eta'$ mixing[J]. Phys. Rev. D, 2010, 81: 034004. arXiv: [0910.0212 \[hep-ph\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.81.034004](#).
- [196] Qin W, Zhao Q, Zhong X H. Revisiting the pseudoscalar meson and glueball mixing and key issues in the search for a pseudoscalar glueball state[J]. Phys. Rev. D, 2018, 97(9): 096002. arXiv: [1712.02550 \[hep-ph\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.97.096002](#).
- [197] Christ N H, Dawson C, Izubuchi T, et al. η And η' Mesons from Lattice QCD[J]. Phys. Rev. Lett., 2010, 105: 241601. arXiv: [1002.2999 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevLett.105.241601](#).
- [198] Michael C, Ottnad K, Urbach C. η And η' Mixing from Lattice QCD[J]. Phys. Rev. Lett., 2013, 111(18): 181602. arXiv: [1310.1207 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevLett.111.181602](#).
- [199] Fukaya H, Aoki S, Cossu G, et al. η' Meson mass from topological charge density correlator in QCD[J]. Phys. Rev. D, 2015, 92(11): 111501. arXiv: [1509.00944 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.92.111501](#).
- [200] Ottnad K, Urbach C. Flavor-singlet meson decay constants from $N_f = 2 + 1 + 1$ twisted mass lattice QCD[J]. Phys. Rev. D, 2018, 97(5): 054508. arXiv: [1710.07986 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.97.054508](#).
- [201] Bali G S, Braun V, Collins S, et al. Masses and decay constants of the η and η' mesons from lattice QCD[J]. JHEP, 2021, 08: 137. arXiv: [2106.05398 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1007/JHEP08\(2021\)137](#).
- [202] Lesk V I, et al. Flavor singlet meson mass in the continuum limit in two-flavor lattice QCD[J]. Phys. Rev. D, 2003, 67: 074503. arXiv: [hep-lat/0211040](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.67.074503](#).
- [203] Hashimoto K, Izubuchi T. η' Meson from Two Flavor Dynamical Domain Wall Fermions[J]. Prog. Theor. Phys., 2008, 119: 599-641. arXiv: [0803.0186 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1143/PTP.119.599](#).
- [204] Dimopoulos P, et al. Topological susceptibility and η' meson mass from $N_f = 2$ lattice QCD at the physical point[J]. Phys. Rev. D, 2019, 99(3): 034511. arXiv: [1812.08787 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.99.034511](#).
- [205] Kuramashi Y, Fukugita M, Mino H, et al. η' Meson Mass in Lattice QCD[J]. Phys. Rev. Lett., 1994, 72: 3448-3451. DOI: [10.1103/PhysRevLett.72.3448](#).
- [206] Zhang R, Sun W, Chen Y, et al. The glueball content of η_c [J]. Phys. Lett. B, 2022, 827: 136960. arXiv: [2107.12749 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1016/j.physletb.2022.136960](#).
- [207] Aoki S, Fukaya H, Hashimoto S, et al. Finite volume QCD at fixed topological charge[J]. Phys. Rev. D, 2007, 76: 054508. arXiv: [0707.0396 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.76.054508](#).

- [208] Bali G S, Collins S, Dürr S, et al. $D_s \rightarrow \eta, \eta'$ Semileptonic decay form factors with disconnected quark loop contributions[J]. Phys. Rev. D, 2015, 91(1): 014503. arXiv: [1406.5449 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.91.014503](#).
- [209] Aoki S, et al. FLAG Review 2019: Flavour Lattice Averaging Group (FLAG)[J]. Eur. Phys. J. C, 2020, 80(2): 113. arXiv: [1902.08191 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1140/epjc/s10052-019-7354-7](#).
- [210] Colangelo G, Gasser J, Leutwyler H. $\pi\pi$ Scattering[J]. Nucl. Phys. B, 2001, 603: 125-179. arXiv: [hep-ph/0103088](#). DOI: [10.1016/S0550-3213\(01\)00147-X](#).
- [211] Endres M G, Kaplan D B, Lee J W, et al. Listening to Noise[J]. PoS, 2011, LATTICE2011: 017. arXiv: [1112.4023 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.22323/1.139.0017](#).
- [212] Bass S D, Moskal P. η' And η mesons with connection to anomalous glue[J]. Rev. Mod. Phys., 2019, 91(1): 015003. arXiv: [1810.12290 \[hep-ph\]](#). DOI: [10.1103/RevModPhys.91.015003](#).
- [213] Ablikim M, et al. Number of J/ψ events at BESIII[J]. Chin. Phys. C, 2022, 46(7): 074001. arXiv: [2111.07571 \[hep-ex\]](#). DOI: [10.1088/1674-1137/ac5c2e](#).
- [214] Gui L C, Chen Y, Li G, et al. Scalar Glueball in Radiative J/ψ Decay on the Lattice[J]. Phys. Rev. Lett., 2013, 110(2): 021601. arXiv: [1206.0125 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevLett.110.021601](#).
- [215] Yang Y B, Gui L C, Chen Y, et al. Lattice Study of Radiative J/ψ Decay to a Tensor Glueball[J]. Phys. Rev. Lett., 2013, 111(9): 091601. arXiv: [1304.3807 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevLett.111.091601](#).
- [216] Gui L C, Dong J M, Chen Y, et al. Study of the pseudoscalar glueball in J/ψ radiative decays[J]. Phys. Rev. D, 2019, 100(5): 054511. arXiv: [1906.03666 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.100.054511](#).
- [217] Jiang X, Sun W, Chen F, et al. η -glueball mixing from $N_f = 2$ lattice QCD[J]., 2022. arXiv: [2205.12541 \[hep-lat\]](#).
- [218] 刘川. 格点量子色动力学导论[M]. 北京: 北京大学出版社, 2017.
- [219] Gattringer C, Lang C B. Quantum chromodynamics on the lattice[M]. Berlin: Springer, 2010. DOI: [10.1007/978-3-642-01850-3](#).
- [220] Jiang X, Chen F, Chen Y, et al. Radiative Decay Width of $J/\psi \rightarrow \gamma\eta_{(2)}$ from $N_f = 2$ Lattice QCD[J]. Phys. Rev. Lett., 2023, 130(6): 061901. arXiv: [2206.02724 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevLett.130.061901](#).
- [221] (张仁强) R Z, (孙玮) W S, (陈飞宇) F C, 等. Annihilation diagram contribution to charmonium masses[J]. Chin. Phys. C, 2022, 46(4): 043102. arXiv: [2110.01755 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1088/1674-1137/ac3d8c](#).

附录一 PyQuda 中的纯规范 HMC 实现

```

import os
2 import numpy as np
import cupy as cp

4
import pyquda
6 from pyquda import core, mpi, field
from pyquda.field import Nc

8
os.environ["QUDA_RESOURCE_PATH"] = ".cache"
10 mpi.init()

12 ensembles = {
    "A1": ([16, 16, 16, 16], 5.789),
14    "B0": ([24, 24, 24, 24], 6),
    "C2": ([32, 32, 32, 32], 6.179),
16    "D1": ([48, 48, 48, 48], 6.475)
}

18
tag = "A1"

20
latt_size = ensembles[tag][0]
22 Lx, Ly, Lz, Lt = latt_size
Vol = Lx * Ly * Lz * Lt

24
beta = ensembles[tag][1]

26
dslash = core.getDslash(latt_size, 0, 0, 0, anti_periodic_t=False)
28 gauge_param = dslash.gauge_param
gauge_param.override_gauge = 0
gauge_param.override_mom = 0
30 gauge_param.use_resident_gauge = 1
gauge_param.use_resident_mom = 1
32 gauge_param.make_resident_gauge = 1
gauge_param.make_resident_mom = 1
34 gauge_param.return_result_gauge = 0
36 gauge_param.return_result_mom = 0

38 gauge = field.LatticeGauge(latt_size, None, True)
gauge.data[:] = cp.diag([1, 1, 1])

40
pyquda.loadGauge(gauge, gauge_param)
42 pyquda.momResident(gauge, gauge_param)

44
def loop_ndarray(path, num_paths, max_length):
46     ret = -np.ones((num_paths, max_length), "<i4")
    for i in range(num_paths):
48         for j in range(len(path[i])):
            ret[i, j] = path[i][j]
50     return ret

52
def path_ndarray(path, num_paths, max_length):
54     ret = -np.ones((4, num_paths, max_length), "<i4")
    for d in range(4):
56         for i in range(num_paths):

```

```

58         for j in range(len(path[d][i])):
            ret[d, i, j] = path[d][i][j]
        return ret

60

62 def path_force(path, coeffs):
    num_paths = len(path)
64     lengths = []
    force = [[], [], [], []]
66     fcoeffs = [[], [], [], []]
    flengths = [[], [], [], []]
68     for i in range(num_paths):
        lengths.append(len(path[i]))
70         loop = np.array(path[i])
        loop_dag = np.flip(7 - loop)
72         for j in range(lengths[i]):
            if loop[j] < 4:
74                 force[loop[j]].append(np.roll(loop, -j)[1:])
                fcoeffs[loop[j]].append(-coeffs[i])
76                 flengths[loop[j]].append(lengths[i] - 1)
            else:
78                 force[loop_dag[lengths[i] - 1 - j]].append(np.roll(loop_dag, j + 1 - lengths
                    [i])[1:])
                fcoeffs[loop_dag[lengths[i] - 1 - j]].append(-coeffs[i])
80                 flengths[loop_dag[lengths[i] - 1 - j]].append(lengths[i] - 1)
    max_length = max(lengths)
82     lengths = np.array(lengths, dtype="<i4")
    coeffs = np.array(coeffs, "<f8")
84     path = loop_ndarray(path, num_paths, max_length)
    assert flengths[0] == flengths[1] == flengths[2] == flengths[3], "path is not symmetric"
86     lengths = np.array(lengths[0], "<i4")
    assert fcoeffs[0] == fcoeffs[1] == fcoeffs[2] == fcoeffs[3], "path is not symmetric"
88     fcoeffs = np.array(fcoeffs[0], "<f8")
    num_fpaths = len(flengths)
90     force = path_ndarray(force, num_fpaths, max_length - 1)
    return num_paths, max_length, path, lengths, coeffs, force, num_fpaths, flengths,
        fcoeffs
92

94 input_path = [
96     [0, 1, 7, 6],
97     [0, 2, 7, 5],
98     [0, 3, 7, 4],
99     [1, 2, 6, 5],
100    [1, 3, 6, 4],
101    [2, 3, 5, 4],
102    [0, 1, 1, 7, 6, 6],
103    [0, 2, 2, 7, 5, 5],
104    [0, 3, 3, 7, 4, 4],
105    [1, 0, 0, 6, 7, 7],
106    [1, 2, 2, 6, 5, 5],
107    [1, 3, 3, 6, 4, 4],
108    [2, 0, 0, 5, 7, 7],
109    [2, 1, 1, 5, 6, 6],
110    [2, 3, 3, 5, 4, 4],
111    [3, 0, 0, 4, 7, 7],
112    [3, 1, 1, 4, 6, 6],
113    [3, 2, 2, 4, 5, 5],
114    ]
    input_coeffs = [
        -5 / 3, -5 / 3, -5 / 3, -5 / 3, -5 / 3, -5 / 3, 1 / 12, 1 / 12, 1 / 12, 1 / 12, 1 / 12,

```

```

116     1 / 12, 1 / 12, 1 / 12,
117     1 / 12, 1 / 12, 1 / 12, 1 / 12
118 ]
119
120 num_paths, max_length, path, lengths, coeffs, force, num_fpaths, flengths, fcoeffs =
121     path_force(
122         input_path, input_coeffs
123     )
124 coeffs *= beta / Nc
125 fcoeffs *= beta / Nc
126
127 rho_ = 0.2539785108410595
128 theta_ = -0.03230286765269967
129 vartheta_ = 0.08398315262876693
130 lambda_ = 0.6822365335719091
131
132 plaquette = pyquda.plaq()
133 print(f"plaquette = {plaquette}")
134
135 t = 1
136 dt = 0.125
137 steps = round(t / dt)
138 dt = t / steps
139 warm = 20
140 for i in range(100):
141     pyquda.gaussMom(i)
142
143     kinetic = pyquda.momAction(gauge_param)
144     potential = pyquda.computeGaugeLoopTrace(1, path, lengths, coeffs, num_paths, max_length
145     )
146     energy = kinetic + potential
147
148     for step in range(steps):
149         pyquda.computeGaugeForce(vartheta_ * dt, force, flengths, fcoeffs, num_fpaths,
150         max_length - 1, gauge_param)
151         pyquda.updateGaugeField(rho_ * dt, gauge_param)
152         pyquda.computeGaugeForce(lambda_ * dt, force, flengths, fcoeffs, num_fpaths,
153         max_length - 1, gauge_param)
154         pyquda.updateGaugeField(theta_ * dt, gauge_param)
155         pyquda.computeGaugeForce(
156             (1 - 2 * (lambda_ + vartheta_)) * dt / 2, force, flengths, fcoeffs, num_fpaths,
157             max_length - 1, gauge_param
158         )
159         pyquda.updateGaugeField((1 - 2 * (theta_ + rho_)) * dt, gauge_param)
160         pyquda.computeGaugeForce(
161             (1 - 2 * (lambda_ + vartheta_)) * dt / 2, force, flengths, fcoeffs, num_fpaths,
162             max_length - 1, gauge_param
163         )
164         pyquda.updateGaugeField(theta_ * dt, gauge_param)
165         pyquda.computeGaugeForce(lambda_ * dt, force, flengths, fcoeffs, num_fpaths,
166         max_length - 1, gauge_param)
167         pyquda.updateGaugeField(rho_ * dt, gauge_param)
168         pyquda.computeGaugeForce(vartheta_ * dt, force, flengths, fcoeffs, num_fpaths,
169         max_length - 1, gauge_param)
170
171     pyquda.projectSU3(1e-10, gauge_param)
172     kinetic1 = pyquda.momAction(gauge_param)
173     potential1 = pyquda.computeGaugeLoopTrace(1, path, lengths, coeffs, num_paths,
174     max_length)
175     energy1 = kinetic1 + potential1

```

```
168     accept = np.random.rand() < np.exp(energy - energy1)
170     if warm > 0:
172         warm -= 1
174     if accept or warm:
176         pyquda.saveGauge(gauge, gauge_param)
178     else:
180         pyquda.loadGauge(gauge, gauge_param)
182     plaquette = pyquda.plaq()
184
186     print(
187         f'''
188 Step {i} stats:
189 PE_old = {potential}, KE_old = {kinetic}
190 PE = {potential1}, KE = {kinetic1}
191 Delta_PE = {potential1 - potential}, Delta_KE = {kinetic1 - kinetic}
192 Delta_E = {energy1 - energy}
193 accept = {accept or not not warm}
194 plaquette = {plaquette}
195 '''
196     )
```


附录二 荐读书目

- (1) 刘川. 格点量子色动力学导论[M]. 北京: 北京大学出版社, 2017
- (2) Gattringer C, Lang C B. Quantum chromodynamics on the lattice[M]. Berlin: Springer, 2010. DOI: [10.1007/978-3-642-01850-3](https://doi.org/10.1007/978-3-642-01850-3)

致 谢

首先,我想要感谢我的两位导师,陈莹研究员和宫明副研究员。陈莹老师耐心,细致且温和,对工作富有热情,他是我博士学习阶段的向导和榜样。他在粒子物理领域有着丰富的经验,各种粒子的质量,宽度和衰变道分支比等数据信手拈来,经常能够基于此给出一些物理的讨论,常常令我受益匪浅。他对于选题的物理讨论是我博士期间最大的收获,让我明白格点 QCD 研究不仅仅是一些统计计算和数据分析,而是有着更深刻的含义。对于学术的敏感性令他时常能够发掘出相当有趣的物理选题,他对学生的引导也有丰富的经验,能够给他们合适的工作内容,我在学习过程中得到了他非常多的帮助,最终论文能够在 PRL 发表与他的指导和努力是密不可分的。

早在我本科毕业设计阶段,宫明老师就已经是我的指导老师,从那时起他在程序框架和实现方面的能力就使我软件开发的能力不断进步。他带领我以及其他同学们完成了神威·太湖之光超级计算机上的格点 QCD 计算软件开发,以及后续的移植工作。在这一过程中,我对于高性能计算和异构计算有了基本的概念与相应的开发能力,是我博士学习期间相当重要的收获,后来我对于软件开发的强烈兴趣也是起源于此。感谢他在软件方面对我进行的指导,没有他的帮助我不可能建立对高性能计算的兴趣,和相关实践经验的积累。我们也经常讨论格点 QCD 软件的架构设想,尽管我们的开发理念不尽相同,这些讨论也一直丰富着我的知识,令我软件开发有着出于不同视角考虑的更全面的设计。

感谢刘朝峰研究员,张仁强师兄,陈飞宇同学和施春江师弟,以及来自西安工业大学的荔宁副教授,我们关于物理问题和软件开发都有不少的讨论,增长了我的知识和经验。他们是本文工作的主要合作者,提供了包括物理分析和交叉检验在内的全面帮助。没有他们,这些工作可能会有纰漏和不严谨之处,再次感谢他们的贡献。他们也作为我的软件的第一批用户,提出了宝贵的意见,帮助我改进了软件的易用性和稳定性。

感谢孙玮师兄和毕玉江师兄,他们在高能所计算中心提供的软件支持是我们能够在高能所和散裂中子源 GPU 集群上完成工作的关键。他们经常需要根据我们的要求完成软件的安装,调试,以及一些机器异常情况的处理。另外,孙玮师兄关于 Chroma 软件的丰富经验也时常为我提供帮助,我咨询过他许多关键参数含义和实现,为我的软件开发工作提供了极大的助力。

感谢来自中科院理论物理所的杨一玻研究员在格点 QCD 的各个方面,包括作用量的物理考量,软件开发甚至是软件推广等各种方面对我提供的帮助。他有着广泛的兴趣和旺盛的精力,使得他在格点 QCD 的很多方面都有着持续贡献。他的学术热情常常令我感到惊讶,同时也非常佩服。他在组会上关于各种物理主题的讨论拓宽了我的眼界,感谢他的指导和帮助。

在开发神威·太湖之光上计算软件的过程中,我认识了来自中科院网络中心

的田英齐同学，浙大的周宇同学以及北航的张增校同学，我们在无锡超算中心共同度过了一段时光。在海洋之光的移植过程还使我认识了来自网络中心的张克龙同学和杨子江同学，我们则在青岛海洋国家实验室有共同工作的经历。我们对申威架构上的软件开发进行了广泛且深入的研究，最终项目通过验收，与他们的贡献是分不开的。感谢他们在高性能计算方面的经验，使得我们的开发和调试工作能够顺利进行，以及对于我个人在计算机方面技能的一些指导。

在高能所我与包括莫哲文同学，张佳钊同学，柴康钰同学等等各位在内的同学有着广泛的交流和讨论，感谢他们在各种方面对我提供的帮助。

最后，感谢我的家人们对我的支持，他们是我能够完成学业最坚实的基础和保障。他们一路的支持，陪伴我完成了 20 年求学路。

再次感谢所有曾经对我提供过帮助的各位，祝福你们未来的人生幸福，顺遂！

2023 年 6 月

作者简历及攻读学位期间发表的学术论文与其他相关学术成果

作者简历：

2014 年 09 月——2018 年 06 月，在中国科学院大学物理科学学院获得学士学位。

2018 年 09 月——2023 年 06 月，在中国科学院高能物理研究所攻读博士学位。

已发表（或正式接受）的学术论文：

- (1) Jiang X, Chen F, Chen Y, Gong M, Li N, Liu Z, Sun W, Zhang R. Radiative Decay Width of $J/\psi \rightarrow \gamma\eta_{(2)}$ from $N_f = 2$ Lattice QCD[J]. Phys. Rev. Lett., 2023, 130(6):061901. arXiv: [2206.02724 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevLett.130.061901](#)
- (2) Chen F, Jiang X, Chen Y, Gong M, Liu Z, Shi C, Sun W. 1^{-+} Hybrid meson in J/ψ radiative decays from lattice QCD[J]. Phys. Rev. D, 2023, 107(5): 054511. arXiv: [2207.04694 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1103/PhysRevD.107.054511](#)
- (3) (张仁强) R Z, (孙玮) W S, (陈飞宇) F C, (陈莹) Y C, (宫明) M G, (蒋翔宇) X J, (刘朝峰) Z L. Annihilation diagram contribution to charmonium masses[J]. Chin. Phys. C, 2022, 46(4): 043102. arXiv: [2110.01755 \[hep-lat\]](#). DOI: [10.1088/1674-1137/ac3d8c](#)

参加的研究项目及获奖情况：

