

Un primer acercamiento a QCD en la red

Daniel González Velázquez

Física de Partículas Elementales

Junio 2020

1. Introducción

La cromodinámica cuántica (QCD) es la teoría que describe las interacciones fuertes. Se formula en términos de campos de gluones y quarks, pero las partículas que observamos son hadrones. Mediante los denominados quarks de valencia se distinguen a los bariones y los mesones. Sin embargo, los hadrones no consisten simplemente de estos quarks de valencia. Por ejemplo, la masa hadrónica no puede explicarse sin considerar que hay una maraña densa de gluones y pares de quark-antiquark virtuales (mar de quarks).

Si bien teorías como la electrodinámica cuántica pueden analizarse perturbativamente a energías bajas, la constante de acoplamiento fuerte impide dicho tratamiento en el caso de QCD, pues su valor es grande en este régimen. La necesidad de hallar un marco que permitiera estudiar la interacción fuerte a estas escalas dio lugar a la teoría de QCD en la red, que fue desarrollada en las décadas de los 70's y 80's.

Las ideas básicas detrás de los cálculos en la red son la discretización y periodización del espacio-tiempo, además del concepto del tiempo euclidiano. Un severo problema numérico en la formulación de integrales de trayectoria es el peso oscilatorio e^{iS} , que se resuelve haciendo una rotación de Wick $t \rightarrow it$; con esto se obtiene la expresión e^{-S_E} con un peso positivo que suprime exponencialmente trayectorias con respecto al mínimo o máximo de la acción euclidiana. Tal procedimiento permite aplicar métodos estocásticos eficientes para evaluar las integrales de la teoría. Si bien éstas no son equivalentes en espacio de Minkowski y en espacio euclidiano, las cantidades observables, en particular los valores propios de la energía, pueden expresarse en términos de integrales euclidianas.

1.1. Función generadora y discretización del espacio-tiempo

Definimos la función generadora de n puntos (o de partición, por su estrecha relación con la termodinámica) en tiempo euclidiano como

$$Z \equiv \int \mathcal{D}\Phi e^{-S_E[\Phi]},$$

donde $\Phi(x)$ representa un campo, S_E es la acción euclidiana (funcional de una configuración del campo Φ) y $\mathcal{D}\Phi$ es la medida funcional para la integración sobre todas las configuraciones. El puente entre esta cantidad y las observables son las funciones de n puntos

$$\langle 0 | T(\Phi(x_1) \dots \Phi(x_n)) | 0 \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\Phi \Phi(x_1) \dots \Phi(x_n) e^{-S_E[\Phi]}.$$

Al adoptar la perspectiva estadística, en perfecta analogía con la física clásica y el formalismo microcanónico, se interpreta a

$$p[\Phi] = \frac{1}{Z} e^{-S_E[\Phi]}$$

como la probabilidad de la configuración Φ .

El campo Φ es una función que depende de variables continuas x_i . La regularización de la red consiste en la discretización del espacio-tiempo. Como se verá más adelante, en QCD los campos masivos (quarks) se definen en los nodos y los campos de norma (gluones) se definen en los enlaces entre ellos [1]. Por simplicidad suele tomarse una red hipercúbica con una separación a entre sitios, lo cual determina la integral $\int \mathcal{D}\Phi \rightarrow \int \prod_x d\Phi_x$.

Como se esperaría, esta forma de abordar el problema tiene varias consecuencias que se plantean en este trabajo. Si bien las simetrías continuas se pierden (aproximadamente), esto no es un inconveniente porque en el límite $a \rightarrow 0$ se recuperan la simetrías del grupo de Poincaré. Es relevante que la invariancia de norma permanece [1].

Un campo masivo $\Phi(x)$ en la red se reduce a Φ_x , lo cual resulta en el confinamiento de los momentos a la primera zona de Brillouin, $p \in (-\pi/a, \pi/a]$. La razón es que la longitud de onda más corta que puede modelarse en una red es $\lambda_{min} = 2a$. De tal modo, al aplicar esto a QCD, los gluones y quarks con momentos $p = 2\pi/\lambda$ mayores que π/a se excluyen de la red; es decir, hay un corte ultravioleta [2].

1.2. Longitud de correlación y la masa inversa

Los sistemas poseen una escala natural, codificada en una cantidad conocida como *longitud de correlación* (en QCD, las masas de las partículas son el inverso de *alguna* longitud de correlación $1/\xi$) [3]. Esta cantidad caracteriza el decaimiento exponencial de la función de correlación conectada $\langle \Phi_x \Phi_y \rangle_c = \langle \Phi_x \Phi_y \rangle - \langle \Phi_x \rangle \langle \Phi_y \rangle$ en distancias grandes $|x - y| \gg a$:

$$\langle \Phi_x \Phi_y \rangle_c \sim \begin{cases} \exp\left(\frac{-|x-y|}{\xi}\right), & V = \infty \\ \cosh\left(\frac{|x-y| - \frac{La}{2}}{\xi}\right), & V = (aL)^d. \end{cases} \quad (1)$$

Cuando se tratan volúmenes finitos es necesario tomar condiciones de borde periódicas, de forma que la invariancia bajo traslaciones discretas se preserve.

En el límite $a \rightarrow 0$, ξ va al infinito en unidades del espaciamiento de la red [3], lo cual da lugar a transición de segundo orden. Esto se traduce en la recuperación de las características de un campo continuo (e.g. la existencia de simetrías del grupo de Poincaré)*.

1.3. Monte Carlo y cadenas de Markov

Los métodos de Monte Carlo son esenciales en la teoría de QCD en la red. La idea es la generación de un gran número de configuraciones del campo $[\Phi]$ distribuidas aleatoriamente de acuerdo con la probabilidad

$$p[\Phi] \sim \exp(-S_E[\Phi]).$$

*El límite al continuo $a \rightarrow 0$ equivale a que la masa física sea mucho más pequeña que el corte en el momento, i.e.,

$$M \ll \frac{1}{a} \implies \xi \gg a.$$

Esto permite construir observables. Los métodos de Monte Carlo en que se generan configuraciones dependientes de un estado inmediatamente anterior se conocen como *cadenas de Markov*. El algoritmo que exploramos aquí es el de *Metropolis*. Para determinar la probabilidad de Metropolis (que establece las condiciones para el tránsito de una configuración a otra) tenemos que recurrir al teorema de Bayes

$$\frac{p[\Phi_1 \rightarrow \Phi_2]}{p[\Phi_2 \rightarrow \Phi_1]} = \frac{p[\Phi_2]}{p[\Phi_1]},$$

donde $p[\Phi_i \rightarrow \Phi_j]$ es la probabilidad de transición de una configuración $[\Phi_i]$ a una configuración $[\Phi_j]$. Además de esto, recordamos que la probabilidad de una configuración está dada por $p[\Phi] = \frac{1}{Z} e^{-S[\Phi]}$. De este modo, la ecuación que debe satisfacerse es

$$\frac{p[\Phi_1 \rightarrow \Phi_2]}{p[\Phi_2 \rightarrow \Phi_1]} = \exp(-\Delta S_E[\Phi_1, \Phi_2]), \quad \Delta S_E[\Phi_1, \Phi_2] = S_E[\Phi_2] - S_E[\Phi_1].$$

A esta condición se le conoce como *balance detallado*. Un algoritmo que respete esta condición es necesario y suficiente para generar un gran número de configuraciones que permita obtener observables. Así bien, la condición es satisfecha por la propuesta

$$p_{\text{Metropolis}}[\Phi_1 \rightarrow \Phi_2] = \begin{cases} 1 & \text{si } \Delta S_E[\Phi_1, \Phi_2] \leq 0, \\ \exp(-\Delta S_E[\Phi_1, \Phi_2]) & \text{otro caso.} \end{cases}$$

Hay alternativas, pero consideraremos este algoritmo por simplicidad conceptual y de implementación [1].

Cuando se realiza una simulación, es necesario que el sistema se termalice, es decir, que ocurra cierto número de pasos para que no haya fluctuaciones importantes que afecten las mediciones. Además, es necesario que las configuraciones que tomamos para las mediciones sean independientes (las cadenas de Markov dependen de la configuración inmediatamente anterior). Por ello, el número de pasos del algoritmo que implementemos debe ser grande (este conjunto constituye las llamadas *configuraciones doradas*: termalizadas y no-correlacionadas). Una cantidad fácil de obtener pero importante es la longitud de correlación que, en sistemas finitos con condiciones periódicas, da lugar a importantes observables ajustando la curva a un coseno hiperbólico (ver Eq. (1)).

Cabe señalar que si bien el método de Monte Carlo permite tener muestras grandes de configuraciones Φ , en la realidad es imposible alcanzar el número de configuraciones totales, que en la mayoría de casos es infinito. Incluso en los casos en que no lo es, el costo computacional de generar todas las configuraciones es un precio que no vale la pena pagar. Esto se compensa por el hecho de podemos analizar muestras suficientemente grandes para que los errores estadísticos sean pequeños; por otro lado, el problema se atenúa al realizar varias mediciones de las observables y promediarlos, disminuyendo variaciones anómalas.

2. Conexión con la estadística

2.1. La integral de trayectoria en tiempo euclidiano

Para que la integral de trayectoria esté bien definida es necesario inclinar el eje de integración ligeramente hacia la región imaginaria del plano complejo. También es posible ir al extremo e inclinar el eje lo suficiente para pasar del tiempo coordinado al llamado tiempo euclidiano (rotación de Wick). En términos de la función de partición $Z = \text{Tr} \exp(-\beta H)$, donde $\beta = 1/T$ es la temperatura inversa, identificamos el operador de evolución temporal bajo $\beta = \frac{i}{\hbar}(t' - t)$. En este sentido,

un sistema a temperatura finita equivale a un sistema propagándose en una dirección temporal puramente imaginaria [2].

Dividiendo el intervalo de tiempo euclidiano en N pasos, i.e., escribiendo $\beta = Na/\hbar$, se tiene

$$Z = \int \mathcal{D}x \exp \left(-\frac{1}{\hbar} S_E[x] \right),$$

donde la acción toma la forma euclidiana

$$S_E[x] = \int dt \left[\frac{m}{2} \dot{x}^2 + V(x) \right] = \lim_{a \rightarrow 0} \sum_i a \left[\frac{m}{2} \left(\frac{x_{i+1} - x_i}{a} \right)^2 + V(x_i) \right].$$

Esta expresión difiere por un signo de la acción definida en tiempo coordinado.

La forma euclidiana de la integral de trayectoria permite evaluar valores de expectación térmicos de la forma usual

$$\langle \mathcal{O}(x) \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}[\mathcal{O}(x) \exp(-\beta H)] = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}x \mathcal{O}(x) \exp \left(-\frac{1}{\hbar} S_E[x] \right).$$

Es interesante considerar la función de dos puntos de un mismo operador en diferentes instancias del tiempo euclidiano

$$\langle \mathcal{O}(x(0)) \mathcal{O}(x(t)) \rangle = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}x \mathcal{O}(x(0)) \mathcal{O}(x(t)) \exp \left(-\frac{1}{\hbar} S_E[x] \right).$$

Usando el operador de evolución temporal y la relación de completez de los estados propios de la energía $|n\rangle$ podemos escribir

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{O}(x(0)) \mathcal{O}(x(t)) \rangle &= \langle 0 | \mathcal{O}(x(0)) e^{-Ht} \mathcal{O}(x(0)) | 0 \rangle \\ &= \sum_{mn} \langle 0 | \mathcal{O}(x) | m \rangle \langle m | n \rangle e^{-E_n t} \langle n | \mathcal{O}(x) | 0 \rangle \\ &= |\langle 0 | \mathcal{O}(x) | 0 \rangle|^2 + \sum_{n>0} |\langle 0 | \mathcal{O}(x) | n \rangle|^2 e^{-E_n t}, \end{aligned}$$

donde $\mathcal{O}(x) = \mathcal{O}(x(0))$ y por simplicidad elegimos $E_0 = 0$.

Consideramos el límite de baja temperatura $\beta \rightarrow \infty$, teniendo en cuenta que los operadores están separados en el tiempo. La función conectada de dos puntos adquiere la forma

$$\langle \mathcal{O}(x(0)) \mathcal{O}(x(t)) \rangle_c \equiv \lim_{\beta, t \rightarrow \infty} \langle \mathcal{O}(x(0)) \mathcal{O}(x(t)) \rangle - |\langle \mathcal{O}(x) \rangle|^2 = |\langle 0 | \mathcal{O}(x) | 1 \rangle|^2 \exp(-E_1 t), \quad (2)$$

donde $|1\rangle$ es el primer estado excitado con energía E_1 .

Vemos que, en consonancia con la Ec. (1), la función conectada (en un tiempo infinito) decrece exponencialmente y el decaimiento está descrito por la brecha de energía $E_1 - E_0$. En una teoría cuántica de campos, esta brecha corresponde a la masa de la partícula más ligera [2]. En resumen, al tomar el tiempo euclidiano, los valores propios de la energía (masas de las partículas en una teoría de campos) pueden determinarse de la función conectada de dos puntos.

Mecánica cuántica	Mecánica estadística
Discretización del tiempo euclidiano	Discretización espacial
Distancia temporal elemental a	Espaciamiento de la red
Posición de partícula x	Variable clásica de espín s
Trayectoria de partícula $x(t)$	Configuración de espín s_x
Integral de trayectoria $\int \mathcal{D}x$	Suma sobre configuraciones $\prod_x \sum_{s_x}$
Acción euclidiana $S_E[x]$	Función hamiltoniana $\mathcal{H}[s]$
Constante de Planck \hbar	Temperatura T
Fluctuaciones cuánticas	Fluctuaciones térmicas
Energía cinética $\frac{1}{2} \left(\frac{x_{i+1} - x_i}{a} \right)^2$	Acoplamiento $s_x s_{x+1}$
Energía potencial $V(x_i)$	Campo externo $\mu B s_x$
Peso de una trayectoria $\exp(-\frac{1}{\hbar} S_E[x])$	Factor de Boltzmann $\exp(-\mathcal{H}[s]/T)$
Valor de expectación del vacío $\langle \mathcal{O}(x) \rangle$	Magnetización $\langle s_x \rangle$
Función de dos puntos $\langle \mathcal{O}(x(0)) \mathcal{O}(x(t)) \rangle$	Función de correlación $\langle s_x s_y \rangle$
Brecha de energía $E_1 - E_0$	Longitud de correlación inversa $1/\xi$
Límite continuo $a \rightarrow 0$	Comportamiento crítico $\xi \rightarrow \infty$

Cuadro 1: Equivalencias entre sistemas cuánticos y estadísticos [3].

2.2. Sistemas de espín en mecánica estadística

La descripción matemática de sistemas clásicos discretos a temperatura finita es muy similar a la formulación de integral de trayectoria de los sistemas cuánticos, si bien su interpretación física difiere en gran medida [3]. En el Cuadro 1 se señalan varias analogías importantes entre la integral de trayectoria euclidiana para un sistema mecánico-cuántico y un sistema de la mecánica clásica.

Uno de los modelos más simples definidos en la red es el *modelo de Ising*, en el que cada nodo puede tomar uno de los valores $s_x = \pm 1^*$. Se trata de un sistema que fluctúa abruptamente y por tanto tiene una acción euclidiana grande, por lo que el algoritmo encuentra formas rápidas de equilibrarlo.

El modelo de Ising está caracterizado por una función hamiltoniana clásica \mathcal{H} que especifica la energía de cada configuración de los espines. Dicha función es una suma de las contribuciones de vecinos adyacentes con una constante ferromagnética $J < 0$ que favorece espines paralelos, más un campo magnético externo B :

$$\mathcal{H}[s] = J \sum_{\langle xy \rangle} s_x s_y - \mu B \sum_x s_x.$$

La función de partición clásica es

$$Z = \int \mathcal{D}s \exp(-\mathcal{H}[s]/T) = \prod_x \sum_{s_x = \pm 1} \exp(-\mathcal{H}[s]/T),$$

*En teoría cuántica de campos tratamos con funciones que tienen un número infinito de posibles valores por cada punto del espacio-tiempo.

y los promedios térmicos se calculan de la forma usual; e.g., la magnetización es

$$\langle s_x \rangle = \frac{1}{Z} \prod_x \sum_{s_x = \pm 1} s_x \exp(-\mathcal{H}[s]/T).$$

Similarmente, la función de correlación (no conectada) es

$$\langle s_x s_y \rangle = \frac{1}{Z} \prod_x \sum_{s_x = \pm 1} s_x s_y \exp(-\mathcal{H}[s]/T).$$

Como en la Ec. (2) la función conectada típicamente tiene la forma

$$\langle s_x s_y \rangle - \langle s_x \rangle \langle s_y \rangle \sim \exp(-|x - y|/\xi),$$

donde ξ es la función de correlación.

En el caso en que las condiciones de borde son periódicas, se tiene

$$\langle s_x s_y \rangle_c \equiv \langle s_x s_y \rangle - \langle s_x \rangle \langle s_y \rangle \sim \cosh\left(\frac{|x - y| - La/2}{\xi}\right).$$

El modelo es una sobresimplificación, pues los materiales magnéticos reales no sólo tienen acoplamientos con sus vecinos adyacentes. Sin embargo, a la temperatura crítica T_c , en la que ξ diverge, un comportamiento universal se manifiesta. En esta temperatura ocurre una transición de fase de segundo orden (totalmente análoga al caso de las teorías cuánticas cuando $a \rightarrow 0$). En $T = T_c$ los detalles del modelo se vuelven irrelevantes; de hecho, el comportamiento de algunos materiales es descrito con alta precisión a esta temperatura [3].

3. Teorías de campos en la red

3.1. Campo escalar

Hasta ahora nos hemos limitado a explorar las analogías entre la mecánica estadística y la física cuántica. Sin embargo, si queremos eventualmente aplicar nuestros resultados a QCD, puede ayudar el estudio de las teorías cuánticas escalares en la red. En mecánica cuántica nuestro único parámetro es el tiempo, mientras que en la teoría cuántica de campos tenemos 4-vectores que describen puntos del espacio-tiempo. Nuevamente adoptando el tiempo euclidiano, describimos la acción del sistema como

$$S_E[\Phi] = \int d^4x \left[\frac{1}{2} \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi + \frac{m^2}{2} \phi^2 \right].$$

Las interacciones se incluyen añadiendo términos con fuentes a la acción. La integral de trayectoria se escribe formalmente como $Z = \int \mathcal{D}\phi \exp(-S_E[\phi])$, donde tomamos $\hbar = 1$.

La integral se hace sobre todas las configuraciones, y es divergente si no se impone ningún tipo de regularización. Para que la expresión esté bien definida matemáticamente, se acude a la teoría de perturbaciones y se estudian los procesos en términos de diagramas de Feynman. En la red, no obstante, definimos el campo Φ_x en puntos discretos del espacio-tiempo separados por una distancia a . En este sentido, la acción adquiere la forma*

$$S_E[\Phi] = \frac{a^2}{2} \sum_{x,y} \phi_x^* M_{xy} \phi_y,$$

*Para aproximar la segunda derivada se usa el método de diferencias finitas [4].

con $M_{xy} = \sum_{\mu=0}^3 (-\delta_{x+a\hat{\mu},y} - \delta_{x-a\hat{\mu},y} + 2\delta_{x,y}) + (ma^2)\delta_{x,y}$. El vector $x + \hat{\mu}$ tiene longitud 1 (en unidades de la red) y va en la dirección μ . De este modo, la integral de trayectoria es

$$Z = \prod_x \int_{-\infty}^{\infty} d\Phi_x \exp(-S_E[\Phi]).$$

La derivada covariante discreta posee invariancia de norma bajo transformaciones locales de $U(1)$ (no escribimos la expresión explícita porque esto se hará más adelante para $SU(3)$ en el caso de QCD, pero el procedimiento es análogo; la base de esto son las llamadas variables *plaqueta*).

3.2. Quarks

Las transformaciones de norma de los quarks en la red son como en el caso continuo: $q(x) \rightarrow V(x)q(x)$ y $\bar{q}(x) \rightarrow \bar{q}(x)V^\dagger(x)$ con $V(x)$ un elemento arbitrario de $SU(3)$. La diferencia es que las posiciones espacio-temporales están restringidas a la red. Asimismo, las cantidades bilineales que involucran quarks pueden hacerse invariantes de norma mediante la *variable de enlace* de punto x a su vecino $x + a\hat{\mu}$. Esta cantidad se define como la integral de línea

$$U_{x,\mu} = \mathcal{P} \exp \left(-i \int_x^{x+a\hat{\mu}} g A_\mu dy \right),$$

donde el operador \mathcal{P} ordena los A_μ en la trayectoria de integración (dicho de otro modo, especifica la dirección sobre la que integramos) [2]. (El campo enlace es un elemento del grupo, en contraste con A_μ , que toma valores en el álgebra de Lie [5]). Por ejemplo, para puntos adyacentes se tiene el producto invariante $\bar{q}_x U_{x,\mu} q_{x+a\hat{\mu}}$.

La acción continua es $S_f = \int d^4x \bar{q} [i D_\mu \gamma^\mu + m_q] q$, donde $D_\mu = \partial_\mu + i A_\mu$ es la derivada covariante. La discretización más simple consiste en reemplazar la derivada con su diferencia simétrica

$$\frac{1}{2a} [U_{x,\mu} q_{x+a\hat{\mu}} - U_{x-a\hat{\mu},\mu}^\dagger q_{x-a\hat{\mu}}].$$

Los factores de U_μ aseguran que $D_\mu q(x)$ se modifica como $q(x)$ bajo transformaciones de norma, de manera que la versión discretizada de $\bar{q}(x) D_\mu \gamma_\mu q(x)$ es invariante de norma. Esta convención, no obstante, sufre de un problema denominado *doblamiento de fermiones**. Hay varias posibilidades para atenuar esta dificultad, e.g. añadiendo el llamado término de Wilson [7].

3.3. Gluones

El valor $A_\mu(x)$ representa el campo de gluones, pero es imposible escribir una versión discretizada que sea invariante de norma [8]. En la sección anterior se definió la variable de enlace $U_{x,\mu}$ que salda el problema. La invariancia de norma es entonces posible dada la transformación

$$U_{x,\mu} \rightarrow V_x U_{x,\mu} V_{x+a\hat{\mu}}^\dagger$$

para $V_x \in SU(3)$. Para enlaces en la dirección negativa se usa el inverso, que es equivalente al transpuesto conjugado dado que los enlaces son matrices de $SU(3)$. Es importante notar que las

*Esto está relacionado con el teorema Nielsen-Ninomiya (ver Ref. [6]). Para una breve discusión sobre las maneras de atajar este problema, ver Ref. [5]

trayectorias de $U_{x,\mu}$ ($U_{x,\mu}^\dagger$) se mueven desde (hacia) x . Cualquier trayectoria puede crearse con un producto de variables de enlace*.

La trayectoria cerrada —invariante de norma— más corta que podemos generar es un cuadrado de lado 1 (llamado *plaqueta*), que matemáticamente se escribe como

$$P_{x,\mu\nu} = \frac{1}{3} \text{Re Tr} \left(U_{x,\mu} U_{x+a\hat{\mu},\nu} U_{x+a\hat{\nu},\mu}^\dagger U_{x,\nu}^\dagger \right).$$

Con esto, la acción de norma de Wilson es

$$S = \beta \sum_x \sum_{\mu < \nu} [1 - P_{x,\mu\nu}],$$

donde $\beta = 6/g^2$ se denomina acoplamiento de la red. La acción de Wilson está basada en los loops de Wilson (la plaqueta es el ejemplo más simple).

Para a pequeña, se puede expandir la plaqueta en una posición x_0 como un polinomio en a :

$$P_{x,\mu\nu} = 1 - \frac{a^4}{6} \text{Tr} (g F_{\mu\nu}(x_0))^2 + \mathcal{O}(a^6), \quad (3)$$

donde $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu + ig[A_\mu, A_\nu]$ es el tensor de intensidad del campo[†]. En el límite continuo $a \rightarrow 0$, se tiene el término cinemático de los gluones $S = \int d^4x \frac{1}{2} \sum_{\mu,\nu} \text{Tr} F_{\mu\nu}^2(x)$. Los términos de orden mayor en la Ec. (3) complican la acción[‡]

$$S = \int d^4x \left[\frac{1}{2} \sum_{\mu,\nu} \text{Tr} F_{\mu\nu}^2(x) + \frac{a^2}{24} \text{Tr} F_{\mu\nu} (D_\mu^2 + D_\nu^2) F_{\mu\nu} + \dots \right].$$

3.3.1. Monte Carlo en QCD

El algoritmo de Monte Carlo aplicado a QCD es similar al discutido con anterioridad, si bien hay algunas complicaciones que incrementan el tiempo de cómputo[§]. Los cambios principales provienen de la ecuación de la acción (que es más costosa), la red (que tiene más dimensiones) y el proceso de Monte Carlo (que requiere más iteraciones, las cuales además involucran el uso de álgebra matricial). La función de partición es

$$Z = \int \mathcal{D}U \det M[U] \exp(-S_E[U]),$$

donde $S_E[U]$ es la acción de norma y M es el determinante fermiónico $\det M = \int \mathcal{D}\bar{\psi} \mathcal{D}\psi \exp(-\bar{\psi} M \psi)$, que se puede calcular sin necesidad de acudir a variables de Grassmann mediante cálculos computacionales [1]. En los casos en que esto no es posible, se usa la llamada *quenched approximation*, en la que $M = \text{const}$ y que corresponde a fermiones no dinámicos.

Una barrida de Monte Carlo de la red puede completarse al efectuar los siguientes pasos de Metropolis:

*Al discretizar el espacio-tiempo se pierden invariancia bajo Lorentz, rotaciones y otras simetrías continuas. ¿Por qué es tan importante mantener invariancia de norma? La razón es, sobre todo, de orden práctico. Con invariancia de norma, los acoplamientos de quark-gluon, tres gluones y cuatro gluones son todos iguales, y la masa del gluón es cero. Sin invariancia de norma, cada uno de estos acoplamientos debe ajustarse independientemente e introducirse una masa gluónica para recuperar QCD. Computacionalmente, esto puede ser muy costoso (ver Ref. [2]).

[†]En esta notación resumida, $A_\mu = T_a A_\mu^a$ tal que los campos A_μ^a describen gluones, T_a son los generadores del grupo $SU(3)$ y g es la constante de acoplamiento de la teoría.

[‡]Se pueden encontrar mejores aproximaciones, i.e., válidas a órdenes mayores en a (ver Ref. [8]).

[§]Para una discusión de los argumentos que dan lugar al análisis computacional de las plaquetas y operadores rectángulo ver Ref. [8]

1. Escoger un sitio x y un enlace n .
2. Escoger aleatoriamente una matriz M de $SU(3)$ tal que $U_{x,\mu} \rightarrow MU_{x,\mu}$.
3. Calcular el cambio en la acción ΔS_E .
4. Si $\Delta S_E < 0$, mantener el cambio $MU_{x,\mu}$.
5. En otro caso, asignar una probabilidad $\exp(-\Delta S_E)$ de cambio.
6. Repetir los pasos 1 – 5 para cada sitio en la trayectoria.

Ya que el algoritmo de Monte Carlo ha generado un conjunto de configuraciones doradas, se pueden calcular observables físicas. Por ejemplo, definiendo los operadores hadrónicos*

$$P_t^+ = \sum_x \bar{d}_{x,t} \gamma_5 u_{x,t}, \quad P_t^- = \sum_x \bar{u}_{x,t} \gamma_5 d_{x,t},$$

donde u y d son los campos de quark para los sabores correspondientes, la masa de los piones cargados M_{π^\pm} se puede obtener ajustando la curva correspondiente a la función de correlación (temporal)

$$\langle P_{s+t}^\pm P_s^{\pm*} \rangle_c \sim \exp(-M_{\pi^\pm} t) \rightarrow \cosh(M_{\pi^\pm} [t - La/2]).$$

El mismo procedimiento aplica a todos los hadrones [1].

4. El modelo de Ising

Para estudiar el algoritmo aplicado a un sistema discretizado y periódico —de extensión finita—, se realizó una simulación del modelo de Ising en una red de 20×20 [4]. El objetivo fue la medición de tres observables: el calor específico, la magnetización y la función de correlación, la última de las cuales permitió la obtención de la longitud de correlación. El Apéndice muestra los códigos de Python desarrollados con este propósito.

El programa comenzó con la termalización del sistema mediante la aplicación de 1000 pasos de Monte Carlo antes de realizar mediciones. Entre cada medición se hicieron 500 actualizaciones de Monte Carlo. Finalmente, se realizó un promedio sobre las configuraciones doradas. El número total de pasos de la simulación fue de 10^6 .

Se obtuvo una gráfica del calor específico que se muestra en la Fig. 1a. El valor crítico de la temperatura es cercano a $T = 2.27$ (unidades $k_B = 1$), en el que hay una transición de fase, análoga a la que encontramos al hacer $a \rightarrow 0$ en las teorías de campo.

Asimismo, en la Fig. 1b se muestra la magnetización por grado de libertad en función de la temperatura. La transición de fase muestra que a partir de la temperatura crítica la magnetización va abruptamente a cero, lo cual indica que las fluctuaciones térmicas dominan el sistema.

Finalmente, en la Fig. 2 se observa la función de correlación para el valor (arbitrario) $T = 2$, donde se usaron 5×10^5 pasos y se tomaron mediciones cada 500 pasos tras 1000 pasos de termalización.

Para la función de correlación χ se utilizó la expresión

$$\chi_n(r) = \sum_i^L \frac{s_{ii} (s_{i,i-r} + s_{i-r,i} + s_{i,i+r} + s_{i+r,i})}{4N},$$

*Los operadores hadrónicos \mathcal{O}_H son aquellos que generan estados $|\phi\rangle$ con los números cuánticos del hadrón al actuar sobre el vacío: $|\phi\rangle = \mathcal{O}_H |\Omega\rangle$.

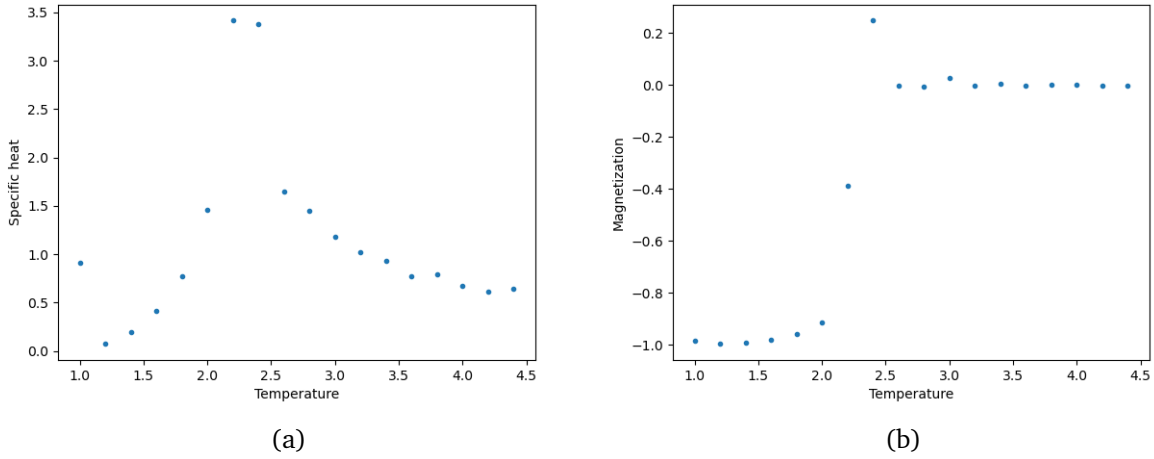


Figura 1: (a) Calor específico como función de la temperatura. (b) Magnetización por grado de libertad como función de la temperatura.

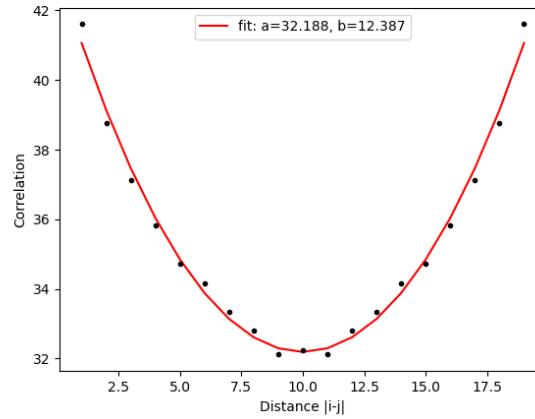


Figura 2: Función de correlación contra distancia en unidades de la red.

donde r es la distancia en unidades de separación entre nodos.

Como con cualquier observable, se deben promediar las M mediciones efectuadas (configuraciones doradas)

$$\chi(r) = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \chi_m(r),$$

donde χ_i y χ_{i+1} están separados por 500 pasos de Monte Carlo.

Un ajuste a la curva de la forma $\alpha \cosh\left(\frac{|i-j|-10}{b}\right)$, en consonancia con la Ec. (1), y dados $a = 1$ y $L = 20$, revela que la longitud de correlación está dada por

$$\xi \equiv b = 12.4.$$

Esta longitud determina la distancia máxima en la que dos espines están efectivamente correlacionados —una correlación positiva indica que ambos espines tienen la misma orientación—.

5. Conclusiones

La teoría de QCD en la red es un acercamiento no perturbativo a la cromodinámica cuántica que se basa en la discretización y periodización del espacio-tiempo (aspectos indispensables desde el punto de vista de la computación numérica). Esto permite analizar QCD a bajas energías, en las que el acoplamiento fuerte es muy grande y no admite el uso de la teoría de perturbaciones. En este trabajo se exploró la estrecha relación que existe entre los sistemas estadísticos y los sistemas de campos cuánticos, particularmente la equivalencia entre la longitud de correlación y la masa de las partículas —siendo la función de correlación la cantidad que permite tal identificación. En ambos casos, se utilizan algoritmos de Monte Carlo (en especial de Metropolis) para analizar sistemas que poseen un gran número de grados de libertad.

Desde un punto de vista muy general, los métodos que se aplican a QCD y al modelo de Ising (analizado en este trabajo) son equivalentes: se genera una gran cantidad de configuraciones con la probabilidad que impone la función hamiltoniana, o la acción en el espacio euclidiano, se determinan numéricamente las funciones de correlación, y con éstas se obtienen los valores esperados de las observables físicas mediante un ajuste de curvas. Como se ha mencionado, el modelo de Ising da lugar a una longitud de correlación, mientras que en QCD se obtienen las masas hadrónicas.

La teoría de QCD en la red concuerda en gran medida con los datos experimentales. Por ejemplo, la masa del protón se ha determinado teóricamente con un error de menos del 2 % [9]. Si bien este acercamiento exige grandes recursos (en la forma de supercomputadoras), permanece como una de las técnicas más importantes para explorar regímenes diversos de una teoría tan constantemente inaprensible como la cromodinámica cuántica.

Referencias

- [1] W. Bietenholz, *Hadron Physics from lattice QCD*, Int. J. Mod. Phys. E, Vol. 25, No. 7, 1642008 (2016).
- [2] R. D. Kenway, *An introduction to Lattice QCD*, European School on High-Energy Physics (1998).
- [3] U.-J. Wiese, *An Introduction to Lattice Field Theory*, Foundations and New Methods in Theoretical Physics, Institut für Theoretische Physik Universität Bern (2009).
- [4] M. Newman, *Computational Physics*, S.I.: Createspace (2013).
- [5] M. Tanabashi et al. (Particle Data Group), Phys. Rev. D 98, 030001 (2018) and 2019 update.
- [6] B. Sheikholeslami and R. Wohlert, *Improved Continuum Limit Lattice Action for QCD with Wilson Fermions*, Nucl. Phys. B 259, 572 (1985).
- [7] M. Wagner, S. Diehl, T. Kuske and J. Weber, *An introduction to lattice hadron spectroscopy for students without quantum field theoretical background*, HGS-HIRE Lecture Week on Hadron Physics (2013).
- [8] J. L. Scott, *Monte Carlo Applications and Lattice QCD*, Honors Scholar Theses 469 (2016).
- [9] S. Dürr, Z. Fodor, J. Frison et al., *Ab Initio Determination of Light Hadron Masses*, Science 322 (5905): 1224–7 (2008).

Apéndice: Código de Python

Observables: magnetización y calor específico

```

import numpy as np
from random import random,randrange
from pylab import plot,ylabel,show,xlabel

# Número de espines en cada dirección
N = 20
J = 1
# Número de pasos de la simulación
steps = 1000000
# Temperatura inicial
T0 = 1

def total_energy(S):
    E_total = 0
    # Definimos la energía total como la suma de las interacciones
    # entre nodos vecinos
    for i in range(N-1):
        E_total -= J*np.sum(S[i,:]*S[i+1,:])
        E_total -= J*np.sum(S[:,i]*S[:,i+1])
    # Condiciones de borde periódicas
    E_total -= J*np.sum(S[N-1,:]*S[0,:])
    E_total -= J*np.sum(S[:,N-1]*S[:,0])
    return E_total

# Termalización: 1000 pasos de Monte Carlo
# Definimos nuestro lattice con valores aleatorios entre -1 y 1
S = np.array([np.array([randrange(-1,2,2) for i in range(N)]) for j in range(N)])
# Calculamos su energía
E = total_energy(S)
for k in range(1000):
    # ALGORITMO DE METROPOLIS
    # Se escoge un espín aleatorio y se invierte
    i = randrange(N)
    j = randrange(N)
    S[i,j] = -S[i,j]
    E_prime = total_energy(S)
    # Se calcula la modificación en la energía debida al cambio
    dE = E_prime-E
    # Se decide si el movimiento se acepta o no
    # (Este es el corazón de Metropolis)
    if random()<np.exp(-dE/T0):
        E += dE
    else:
        S[i,j] = -S[i,j]

```

```

def observables(T,steps,S):
    # Aquí guardaremos nuestras configuraciones doradas
    energy,energy_squared = [],[]
    magnetization = []
    E = total_energy(S)
    for k in range(steps):
        # ALGORITMO DE METROPOLIS
        # Se escoge un espín aleatorio y se invierte
        i = randrange(N)
        j = randrange(N)
        S[i,j] = -S[i,j]
        E_prime = total_energy(S)
        dE = E_prime-E
        # Se decide si el movimiento se acepta o no
        # Este es el corazón de Metropolis
        if random()<np.exp(-dE/T):
            E += dE
        else:
            S[i,j] = -S[i,j]
        # Para evitar correlación medimos cada 500 pasos
        if (k%500==0) and (k>1000):
            energy.append(E)
            energy_squared.append(E**2)
            magnetization.append(sum(sum(S)))
    # promediamos los valores obtenidos para definir observables
    cv = (np.average(energy_squared)-np.average(energy)**2)/(T*N**2)
    magnetization_avg = np.average(magnetization)/N**2
    return cv,magnetization_avg

# Magnetización y calor específico a distintas temperaturas
T_axis = np.arange(T0,4.6,0.2)
cv_axis,magnetization_axis = [],[]
for T in T_axis:
    cv,magnetization_avg=observables(T,steps,S)
    cv_axis.append(cv)
    magnetization_axis.append(magnetization_avg)

# Gráficas
plot(T_axis,cv_axis,'.')
ylabel("Specific heat")
xlabel("Temperature")
show()

plot(T_axis,magnetization_axis,'.')
ylabel("Magnetization")
xlabel("Temperature")
show()

```

Función de correlación

```

import numpy as np
from random import random,randrange
from pylab import plot,ylabel,show,xlabel

N = 20
J = 1
steps = 500000
T = 2

def total_energy(S):
    E_total = 0
    # Definimos la energía total como la suma de las interacciones
    # entre nodos vecinos
    for i in range(N-1):
        E_total -= J*np.sum(S[i,:]*S[i+1,:])
        E_total -= J*np.sum(S[:,i]*S[:,i+1])
    # Condiciones de borde periódicas
    E_total -= J*np.sum(S[N-1,:]*S[0,:])
    E_total -= J*np.sum(S[:,N-1]*S[:,0])
    return E_total

# Termalización: 1000 pasos de Monte Carlo
# Definimos nuestro lattice con valores aleatorios entre -1 y 1
S = np.array([np.array([randrange(-1,2,2) for i in range(N)]) for j in range(N)])
# Definimos una lista vacía para almacenar nuestras mediciones de la correlación
corr = np.zeros([N,int(steps/500)-2])
# Calculamos su energía
E = total_energy(S)

# ALGORITMO DE METROPOLIS
# Se escoge un espín aleatorio y se invierte
for k in range(steps):
    i = randrange(N)
    j = randrange(N)
    S[i,j] = -S[i,j]
    E_prime = total_energy(S)
    # Se calcula la modificación en la energía debida al cambio
    dE = E_prime-E
    # Se decide si el movimiento se acepta o no
    # (Este es el corazón de Metropolis)
    if random()<np.exp(-dE/T):
        E += dE
    else:
        S[i,j] = -S[i,j]
# Termalización: 1000 pasos de Monte Carlo
if (k%500==0) and (k>1000):

```

```

        for m in range(N):
            for n in range(N):
                # Implementación de condiciones de frontera NOTA: IDENTAR
if (n-m)>=0 and (n+m)<N:
    corr[m,int(k/500)-2] += S[n,n]*(S[n,n-m]+S[n-m,n]+S[n,n+m]+S[n+m,n])
elif (n-m)<0 and (n+m)<N:
    corr[m,int(k/500)-2] += S[n,n]*(S[n,N+(n-m)]+S[N+(n-m),n]+S[n,n+m]+S[n+m,n])
elif (n-m)>=0 and (n+m)>=N:
    corr[m,int(k/500)-2] += S[n,n]*(S[n,n-m]+S[n-m,n]+S[n,(n+m)-N]+S[(n+m)-N,n])
elif (n-m)<0 and (n+m)>=N:
    corr[m,int(k/500)-2] += S[n,n]*(S[n,N+(n-m)]+S[N+(n-m),n]+S[n,(n+m)-N]+S[(n+m)-N,n])

# Promediamos los valores que obtuvimos para la correlación
correlation = corr.sum(axis=1)/(4*N**2)

#Gráficas
plot(range(1,N),correlation[1:],'.')
ylabel("Correlation")
xlabel("Distance |i-j|")
show()

```

Ajuste de curva

```

import matplotlib.pyplot as plt
import scipy.optimize as opt
import numpy as np

xdata = np.arange(1,20,1)
# Datos obtenidos del cálculo de la función de correlación
ydata=[41.605,38.7675,37.115,35.825,34.71,34.17,33.3475,32.79,32.1125,32.245,
        32.1125,32.79,33.3475,34.17,34.71,35.825,37.115,38.7675,41.605]

# Función a ajustar
def func(x,a,b):
    return a*np.cosh((x-10)/b)

# Código para encontrar parámetros a y b que ajustan curva
popt, pcov = opt.curve_fit(func, xdata, ydata)

#Gráficas
plt.plot(xdata, func(xdata, *popt), 'k-',label='fit: a=%5.3f, b=%5.3f' % tuple(popt))
plt.scatter(xdata,ydata)
plt.xlabel('Distance |i-j|')
plt.ylabel('Correlation')
plt.legend()
plt.show()

```