Cromodinâmica Quântica na Rede: Simulando Quarks e Glúons no Computador

Tereza Mendes*
Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo
C.P. 369, CEP 13560-970, São Carlos SP

30 de Janeiro de 2003

Resumo

Simulações numéricas de Monte Carlo aplicadas à formulação de rede da cromodinâmica quântica (QCD) possibilitam o estudo da teoria a partir de primeiros princípios, de forma não perturbativa. Após duas décadas de desenvolvimento da metodologia para este estudo e com os atuais sistemas computacionais na faixa de Teraflops, simulações de QCD na rede têm hoje condições de fornecer previsões quantitativas com erros de poucos pontos porcentuais. Isto significa que estas simulações serão em breve a principal fonte de resultados teóricos para comparação com experimentos de física das interações fortes. É então um importante momento para o início da participação brasileira na área.

1 Introdução

A cromodinâmica quântica (QCD) é a teoria de gauge que descreve as interações fortes, presentes entre os hádrons (por exemplo prótons e nêutrons) [1]. A descrição é baseada em um modelo de partículas elementares — os **quarks** — dotados de "carga de cor" e interagindo por troca de campos de gauge — os **glúons**. Trata-se de uma teoria quântica de campos, com simetria local de gauge $SU(3)$, correspondendo a três possíveis cores. A QCD é escrita de forma simples e elegante. Seus parâmetros são apenas as massas dos vários tipos (chamados "sabores") de quarks considerados e o valor da

*Pesquisa financiada pela FAPESP, Proc. No. 00/05047-5.

constante de acoplamento forte. A não ser pela simetria sob o grupo de gauge $SU(3)$ [ao invés do grupo $U(1)$], a forma da lagrangiana da QCD é a mesma que a da eletrodinâmica quântica (QED), com os quarks correspondendo aos elétrons e os glúons aos fótons. (Os dois primeiros são férmions de spin 1/2 e os dois últimos são bósons vetoriais sem massa.) Analogamente, a constante de acoplamento forte α_s corresponde à constante de estrutura fina $\alpha \approx 1/137$. O fato de o grupo de gauge da QCD não ser abeliano introduz, porém, diferenças qualitativas entre as duas teorias, refletindo as diferenças entre as interações fortes e as interações eletromagnéticas. Em particular, obtém-se que os glúons possuem carga de cor e portanto interagem entre si, ao contrário dos fótons.

Uma característica importante da interação forte é que a constante de acoplamento α_s torna-se desprezível somente no limite de pequenas distâncias, ou equivalentemente no limite de altas energias ou momentos. Esta propriedade é chamada de **liberdade assintótica**. A distâncias maiores (i.e. a energias menores) há um aumento da intensidade da interação e acredita-se que a grandes distâncias a força de atração entre quarks seja constante, determinando o **confinamento** de quarks e glúons dentro de hádrons. O fato de α_s não ser desprezível a baixas energias faz com que o estudo de fenômenos importantes como o mecanismo de confinamento, o espectro de massas dos hádrons e a transição de desconfinamento a temperatura finita seja inacessível a cálculos por teoria de perturbação, que se baseia em uma expansão a acoplamentos fracos. Estes fenômenos devem portanto ser estudados de maneira **não-perturbativa**.

O estudo não-perturbativo da QCD é possível na formulação de rede da teoria [2]. Nesta formulação — que consiste na quantização por meio de integrais de trajetória, na continuação para tempos imaginários ou euclidianos e na regularização de rede (dada pela discretização do espaço-tempo) — a teoria torna-se equivalente a um modelo de mecânica estatística clássica. O limite do contínuo, no qual são obtidos os resultados físicos, é dado pelo ponto crítico deste modelo, que pode ser estudado através dos métodos usuais em mecânica estatística. Em particular, podem ser aplicadas simulações numéricas de **Monte Carlo**, que se baseiam em uma descrição estocástica dos sistemas considerados [3]. Devido à maior complexidade da interação e ao grande número de graus de liberdade, estas simulações são muito mais elaboradas para a QCD do que para os modelos usuais em mecânica estatística, requerendo consideráveis recursos computacionais. De fato, é em geral necessária a simulação em potentes super-computadores paralelos, alguns dos quais foram projetados e produzidos especificamente para o estudo da QCD na rede, como o `QCDSP` nos EUA, o `Hitachi/CP-PACS` no Japão e o `APE-Mille` na Europa, todos com desempenho na faixa de Teraflops. Apenas recentemente tornou-se possível a simulação da QCD em sistemas de computadores de pequeno porte, os chamados **clusters de PCs**. Estes sistemas não apresentam ainda a mesma eficiência de paralelização das máquinas de arquitetura paralela, mas seu custo é muito menor. Além da potência computacional, são muito importantes nesta área as técnicas numéricas e analíticas utilizadas nas simulações e na interpretação dos dados produzidos. Progressos significativos têm sido alcançados através do desenvolvimento de algoritmos de simulação mais eficientes, de novos métodos de interpolação e extrapolação dos dados numéricos e de um melhor entendimento dos efeitos sistemáticos a que os resultados das simulações podem estar sujeitos, como efeitos de volume finito e efeitos de discretização.

Há atualmente um grande interesse nos resultados das simulações descritas acima e espera-se que sejam finalmente resolvidas diversas questões teóricas a respeito do modelo padrão e da QCD [4]. De fato, apesar da grande dificuldade computacional, estudos numéricos de QCD na rede têm fornecido importantes contribuições recentemente, como cálculos acurados da constante de acoplamento forte [5] e do espectro de massas hadrônicas [6]. Em particular, simulações de rede constituem a única evidência conhecida para a transição de desconfinamento de quarks a temperatura finita [7], sendo suas previsões de direto interesse para os atuais experimentos de busca de novos estados da matéria nos laboratórios Brookhaven e CERN.

Simulações da chamada QCD completa — i.e. incluindo efeitos de férmions dinâmicos — para massas de quarks na região dos valores físicos são ainda extremamente lentas, devendo em geral ser realizadas em super-computadores como os mencionados acima e envolvendo o esforço de colaborações nacionais, como a UKQCD no Reino Unido e a JLQCD no Japão. Os métodos utilizados nestas simulações, que levam em média muitos meses ou até alguns anos, são desenvolvidos através de estudos de versões simplificadas da teoria, como a QCD pura — a chamada aproximação *quenched*, em que são desprezados os efeitos de férmions dinâmicos — e a teoria $SU(2)$ pura, ou modelos em dimensões mais baixas. A consideração deste tipo de problemas e o uso de clusters de PCs é o objetivo de nosso grupo de pesquisa no IFSC–USP.

2 A Formulação de Rede

Uma dificuldade no estudo da QCD, comum a virtualmente todas as teorias quânticas de campos, é o aparecimento de divergências ultra-violeta (i.e.

para altas energias ou curtas distâncias) no cálculo de quantidades físicas [8]. Só após a remoção destes "infinitos" através de algum procedimento de renormalização são obtidos resultados finitos, que podem ser comparados aos experimentos. É necessário portanto primeiramente regularizar a teoria, escrevendo-a de modo que sejam isoladas as singularidades, para depois removê-las através de uma redefinição dos parâmetros da lagrangiana. A formulação da QCD na rede, introduzida em 1974 por Wilson [9], oferece uma regularização não-perturbativa conveniente, preservando a invariância de gauge da teoria. Quarks são representados em pontos da rede e glúons nos elos entre pontos vizinhos. Os campos gluônicos são dados por matrizes $SU(3)$. A ação de rede é escrita em termos de produtos das variáveis de elos ao longo de percursos fechados, de forma a preservar a simetria de gauge da ação original. Uma ótima introdução à QCD na rede é a Ref. [2]. Os ingredientes essenciais para a formulação de rede são:

1. O formalismo de integrais de trajetória de Feynman, em que os valores esperados dos observáveis de interesse são escritos como integrais sobre todos os graus de liberdade do problema, com um peso dado pela exponencial da ação clássica da teoria.

2. A formulação euclidiana, obtida pela continuação analítica da variável temporal a tempos imaginários. Desta forma a exponencial (complexa) oscilatória presente nas integrais descritas acima torna-se real e pode ser interpretada como uma distribuição de probabilidades.

3. A introdução da rede discreta para o espaço-tempo. Correspondentemente, operadores diferenciais são re-escritos como diferenças finitas dos campos discretizados.

A combinação dos dois primeiros ingredientes evidencia a equivalência de teorias quânticas de campo com a mecância estatística clássica: no espaço euclidiano uma integral de trajetória para a teoria quântica equivale a uma média térmica para o sistema estatístico correspondente. Para a QCD, o quadrado da constante de acoplamento nua (*bare*) g_0 da teoria de campos corresponde diretamente à temperatura $1/\beta$ do modelo estatístico.

O terceiro ingrediente — a discretização de rede — representa uma regularização ultra-violeta. De fato, o espaçamento de rede a corresponde a um corte para momentos altos, já que não podem ser representados na rede momentos acima de $\sim 1/a$. Desta forma são suprimidos os modos causadores de divergências e a teoria é bem definida, ou seja valores esperados de observáveis são finitos. Para que seja recobrada a teoria no espaço contínuo é preciso tomar-se o limite $a \to 0$. Neste processo é necessário "sintonizar" os parâmetros nus da teoria — por exemplo a constante de acoplamento nua g_0 — de forma que quantidades físicas (funções de correlação, massas, etc.) convirjam para valores finitos, que podem então ser comparados a experimentos. Em particular, comprimentos de correlação ξ (correspondendo a massas inversas) medidos em unidades físicas — por exemplo fermis — devem tender a limites finitos à medida que o espaçamento a (medido em fermis) tende a zero. Isto significa que o comprimento de correlação medido em unidades do espaçamento de rede ξ/a deve tender a infinito. Em outras palavras, a teoria de rede considerada deve se aproximar de um ponto crítico, ou transição de fase de segunda ordem. O estudo do limite do contínuo em teorias quânticas de campo na rede é portanto análogo ao estudo de fenômenos críticos em mecânica estatística. A correspondência entre as teorias de campos euclidianas e a mecânica estatística clássica permite a aplicação de métodos usuais de física estatística ao estudo da QCD. Podem ser usadas, por exemplo, expansões de altas e baixas temperaturas, correspondendo respectivamente às expansões em acoplamentos fortes e fracos para a teoria de campos. Outro exemplo de interação entre teorias de campos e mecânica estatística é o método de grupo de renormalização, desenvolvido para ambas as áreas paralelamente [8]. Uma técnica estatística particularmente importante, sobretudo para a QCD, é a simulação de Monte Carlo, que permite um estudo não-perturbativo dos modelos considerados.

3 Simulação Numérica de Monte Carlo

Métodos de Monte Carlo são em geral utilizados para amostrar de maneira estocástica a distribuição de Boltzmann para um sistema estatístico [3]. São geradas no computador N configurações para o sistema, de modo que cada configuração seja escolhida com probabilidade dada por seu peso de Boltzmann. A média de um observável sobre as N configurações produzidas converge para o valor esperado (ou média termodinâmica) deste observável no limite $N \to \infty$. Para valores grandes (finitos) de N obtêm-se valores centrais para as médias dos observáveis de interesse com um erro estatístico proporcional a $1/\sqrt{N}$. É possível portanto obter um erro arbitrariamente pequeno aumentando-se o número de configurações produzidas, ou seja aumentando-se o investimento computacional. A distribuição de Boltzmann pode ser definida através de um modelo para um sistema físico, especialmente se este sistema puder ser discretizado, seja naturalmente ou por uma aproximação. Em diversos exemplos a arte das simulações está na escolha (ou invenção) apropriada de um modelo, por exemplo a modelagem de polímeros através de passeios aleatórios. No caso de teorias de gauge na rede, como descrito na seção anterior, a distribuição de Boltzmann é dada diretamente a partir da lagrangiana (ou equivalentemente a ação) da teoria, sem aproximações além da discretização do espaço-tempo, permitindo portanto um estudo não-perturbativo a partir de primeiros princípios.

A fim de gerar configurações com o peso estatístico desejado, introduz-se em geral uma dinâmica markoviana para o sistema considerado, de forma que a cadeia de Markov resultante tenha como distribuição de equilíbrio a distribuição de Boltzmann para o sistema. Neste tratamento as médias termodinâmicas descritas acima são calculadas como médias temporais na dinâmica escolhida. A cada "instante de tempo" é sorteada uma nova configuração para o sistema, de maneira a respeitar a distribuição (de equilíbrio) apropriada. A não ser por esta restrição, as atualizações que determinam a dinâmica podem ser escolhidas da maneira que for mais conveniente, sem coincidir necessariamente com a dinâmica física para o sistema fora do equilíbrio. Parte-se de uma condição inicial geral e segue-se a seqüencia temporal por aplicações sucessivas da operação de atualização, que gera uma nova configuração a partir da atual. É comum portanto pensar no sistema simulado como evoluindo por conta própria e freqüentemente diz-se que os observáveis são "medidos" ao invés de calculados. Há também o erro estatístico associado ao método estocástico, como mencionado acima, e devem ser aplicadas análises de erro para determinar a precisão final do resultado. Estas características destacam as semelhanças com o estudo experimental, sendo inclusive usados os mesmos métodos de análise dos dados. É preciso lembrar porém que se tratam de "experimentos" numéricos, feitos a partir da teoria (no caso da QCD) ou a partir de um modelo para o sistema físico (no caso da mecânica estatística).

A simulação de teorias de gauge na rede, em particular a QCD, constitui uma das áreas de aplicação mais intensiva das simulações de Monte Carlo [3, Cap. 11]. Como dito na Introdução, esta modalidade de estudo torna-se crucial para a QCD, já que não é possível o tratamento perturbativo da teoria nas regiões de energia de interesse. Apesar da similaridade dos métodos, a simulação de Monte Carlo para teorias de gauge é muito mais complexa do que no caso dos modelos usuais de mecânica estatística, requerendo grande esforço computacional e técnicas numéricas específicas para a produção dos dados. Além disso, a interpretação física dos dados gerados depende da correta extrapolação ao limite do contínuo, ou seja é preciso "voltar" para o espaço contínuo após a simulação na rede. Mais especificamente, é necessária a consideração de três limites para que os resultados físicos desejados possam ser obtidos a partir dos dados das simulações:

• **O limite de volume infinito (ou limite termodinâmico):** Assim como para a mecânica estatística, simulações da QCD são feitas em volumes finitos de rede, já que a memória do computador é finita. O volume da rede deve então ser suficientemente grande em relação à distância física relevante para o problema estudado, de forma que os efeitos de volume finito não sejam apreciáveis. (Correspondentemente, não podem ser consideradas energias ou momentos pequenos demais, já que a rede finita equivale a um corte infra-vermelho.) Efeitos de volume finito podem em geral ser estimados através de uma análise de escala de tamanho finito (*finite-size scaling*) para os dados. Para as simulações da QCD são em geral suficientes redes de lado $L \approx 7\,fm$.

• **O limite do contínuo:** Para que seja recuperada a física original do contínuo é preciso tomar-se o limite $a \to 0$. Ao mesmo tempo, as quantidades calculadas devem ser renormalizadas, ou seja redefinidas de forma a gerar resultados finitos no limite do contínuo. Isto pode ser feito de forma não-perturbativa utilizando-se os valores físicos de alguns observáveis, conhecidos experimentalmente. Por exemplo, escrevendo-se a massa do píon calculada na rede como $m_\pi\, a$ (onde m_π é a massa física), obtém-se o valor do corte ultra-violeta a em unidades físicas. As outras quantidades calculadas podem então ser escritas da mesma forma em termos de a (que tende a zero) e "traduzidas" em unidades físicas, gerando valores (físicos) finitos. Na prática, o valor de a deve ser suficientemente pequeno quando comparado à distância relevante para o problema, por exemplo $a \approx 0.05\,fm$. É importante notar que são possíveis diversas discretizações para a ação, podendo ser usadas as chamadas ações melhoradas (*improved actions*), que convergem para a ação do contínuo mais rapidamente, ou seja para valores maiores de a. (São também possíveis diversas discretizações para os campos fermiônicos.)

• **O limite quiral:** É bastante difícil considerar valores físicos para as massas dos quarks nas simulações. Isto ocorre especialmente para os quarks leves (up e down), que possuem massas próximas a zero, o chamado limite quiral. As simulações são em geral feitas para massas maiores e os resultados são posteriormente extrapolados usando-se a teoria de perturbação quiral.

Os limites acima não são independentes, pois para atingir o limite do contínuo e para que sejam consideradas massas pequenas para os quarks é necessário um número suficientemente grande de pontos na rede (correspondendo a um espaçamento de rede suficientemente pequeno e a um tamanho físico suficientemente grande para a rede), o que aumenta muito o investimento computacional. Por exemplo, com os algoritmos atuais, uma simulação com os valores de L e a ideais acima e para valores físicos das massas de quarks duraria [12] aproximadamente 300 anos em um super-computador com potência de $1\,Tflop$, correspondente às máquinas mais rápidas existentes hoje.[1] Com o emprego de ações melhoradas e fazendo uso da extrapolação ao limite quiral, a mesma simulação pode ser realizada em 2 anos. Estas simulações são bem mais rápidas para o chamado caso *quenched*, em que as configurações são produzidas considerando-se quarks de massa infinita, ou seja sem levar em conta efeitos de férmions dinâmicos. (Note que os observáveis calculados para cada configuração ainda podem incluir os quarks desejados, os quais são então chamados de quarks de valência.) Apesar de corresponder a uma aproximação grosseira (e sobre a qual não temos controle), verifica-se em muitos casos que o caso quenched apresenta poucas correções em relação à QCD completa, indicando que nestes casos o efeito de férmions dinâmicos é pequeno. Hoje em dia podem ser realizadas simulações do caso quenched com boa precisão e encontram-se também em andamento diversas simulações da QCD com quarks dinâmicos, para diversas discretizações do operador de Dirac.

4 Progressos em QCD na Rede

Os progressos na área são divulgados anualmente na conferência *Lattice* [10]. São descritas abaixo brevemente três contribuições importantes da QCD na rede para a confirmação/previsão de resultados experimentais.

• **Constante de acoplamento forte:** A constante de acoplamento forte $\alpha_s(\mu_0)$, tomada a uma escala de referência fixa μ_0, é o único parâmetro livre da QCD e deve portanto ser conhecida com a mais alta precisão possível. Simulações numéricas de QCD na rede são capazes hoje em dia de produzir cálculos para α_s com precisão comparável à experimental ou melhor. Estes resultados são atualmente incluídos na média mundial para esta quantidade [5]. O valor de α_s deveria também ser determinado com boa precisão ao longo de um intervalo de escala tão grande quanto possível, descrevendo o comportamento da interação entre os regimes não-perturbativo (acoplamento forte) e perturbativo (acoplamento fraco). Vários métodos para cálculo da constante forte *running* vêm sendo explorados, tanto na QCD quenched como na teoria completa. Uma revisão recente destes métodos é feita em [11].

• **Espectro hadrônico:** É possível obter valores físicos para massas hadrônicas a partir de simulações da QCD na rede, como descrito acima. Para isso devem ser ajustados os $n_f + 1$ parâmetros da teoria onde n_f é o número de

[1] Um Teraflop (*Tflop*) equivale a 10^{12} operações de ponto flutuante por segundo.

sabores de quarks considerados. Consequentemente, devem ser usados $n_f + 1$ resultados experimentais conhecidos e os cálculos restantes serão previsões da simulação numérica. O espectro de massas para os hádrons leves (incluindo os dois quarks leves e o quark estranho) foi determinado para o caso quenched com grande precisão em [6]. Verifica-se que não há concordância com o espectro experimental, mas que as discrepâncias observadas são de apenas 10%, no máximo. Vemos portanto que a diferença introduzida pela aproximação quenched é apenas quantitativa. Cálculos semelhantes encontram-se em andamento para o caso da QCD completa.

• **Transição de fase na QCD:** A transição de fase prevista para a QCD a altas temperaturas é claramente observada em simulações da QCD na rede [7]. Para o caso quenched estuda-se a transição de desconfinamento propriamente dita, enquanto que para a QCD completa deve ser considerada a transição de restauração da simetria quiral, uma simetria exata da lagrangiana no limite de massa zero para os quarks e que é quebrada espontaneamente a baixas temperaturas. Estudos da QCD pura (aproximação quenched) são feitos com alta precisão para a determinação da temperatura crítica e da equação de estado termodinâmica do sistema. São encontradas neste caso diferenças qualitativas entre a QCD pura e a QCD completa.

5 QCD na Rede no IFSC–USP

Desde o início de 2001 temos desenvolvido um projeto de simulações numéricas de teorias de gauge na rede no IFSC–USP, com financiamento da FAPESP [13]. O projeto envolveu a instalação de um cluster de PCs com 16 nós de processamento, com CPU Pentium III (de 866 MHz) e 256 MB de memória.[2] Temos efetuado simulações produtivas desde Julho de 2001 e recentemente iniciamos simulações paralelas intensivas. Consideramos aplicações que requerem moderado poder computacional, como vários problemas para a teoria $SU(2)$ pura. Em particular, propomos um novo método de estudo da constante de acoplamento runnning α_s, baseado no cálculo de propagadores de glúons e de ghosts [11]. Também estamos realizando estudos numéricos das propriedades infravermelhas da QCD (através do estudo do comportamento de propagadores de glúons e de ghosts neste limite), de técnicas de fixação do gauge na rede, da transição quiral para a QCD no caso de dois férmions dinâmicos [em que são previstas analogias com o modelo de spins $O(4)$], da transição de fase eletro-fraca e de aspectos de modelos de spins e percolação.

[2] A potência computacional resultante é de aproximadamente $14\,Gflops$.

Agradecimentos

Agradeço a colaboração de Attilio Cucchieri na preparação deste manuscrito.

Referências

[1] *An Elementary Primer for Gauge Theory*, K. Moriyasu, (World Scientific, Cingapura, 1983).

[2] *Lattice gauge theories. An introduction*, H.J. Rothe, (World Scientific, Cingapura, 1997).

[3] *A guide to Monte Carlo simulations in Statistical Physics*, D.P. Landau e K. Binder, (Cambridge University Press, Cambridge, 2000).

[4] *Opportunities, challenges, and phantasies in lattice QCD*, F. Wilczek, apresentado na *Lattice 2002*, Boston, EUA, 24–29 de Junho de 2002, `http://arXiv.org/abs/hep-lat/0212041`.

[5] *Quantum chromodynamics*, I. Hinchliffe, em *Review of particle physics*, Particle Data Group (K. Hagiwara et al.), Phys. Rev. D 66 (2002) 010001.

[6] *Quenched light hadron spectrum*, S. Aoki et al. (colaboração CP-PACS), Phys. Rev. Lett. 84, 238 (2000).

[7] *Lattice QCD at high temperature and density*, F. Karsch, Lect. Notes Phys. 583, 209 (2002).

[8] *Quantum and Statistical Field Theory*, M. Le Bellac, (Oxford University Press, Oxford, 1995).

[9] *Confinement of Quarks*, K.G. Wilson, Phys. Rev. D10, 2445 (1974).

[10] Anais do *International Symposium on lattice field theory*, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) 106–107 (2002) e anos anteriores.

[11] *Lattice simulations for the running coupling constant of QCD*, A. Cucchieri, apresentado na *Hadrons 2002*, Bento Gonçalves RS, 14–19 de Abril de 2002, `http://arXiv.org/abs/hep-lat/0209076`.

[12] *Progress in lattice gauge theory*, S.R. Sharpe, em *Vancouver 1998, High energy physics*, vol. 1, 171–190, `http://arXiv.org/abs/hep-lat/9811006`.

[13] `http://lattice.if.sc.usp.br/`.