

格点 QCD 研究冷核物理问题的若干最新进展

耿立升

(北京航空航天大学物理科学与核能工程学院 100191)

1. 引言

现代物理学研究表明,自然界存在四种基本相互作用:引力相互作用、电磁相互作用、弱相互作用和强相互作用(图1)。其中,引力最早为人们所知,1687年牛顿在《自然哲学的数学原理》中首次阐述了万有引力定律;其次为电磁相互作用,1864年麦克斯韦提出了电磁场的基本方程组(麦克斯韦方程组),将电与磁统一起来,并预言了电磁波的存在。引力和电磁力作用于宏观世界,其效应可以在大尺度范围内观测到,所以最早进入人们的视野。20世纪以来,随着实验手段的不断改进,人类认识世界的本领日益增强。科学家们发现,除了引力和电磁相互作用,自然界还存在另外两种相互作用,即强相互作用和弱相互作用。与引力和电磁力相比,这两种相互作用的力程为微观尺度,所以最晚为人们所认识。强相互作用将夸克、胶子束缚在强子内,比如将u、u、d三个价夸克束缚成质子。此外,强相互作用还负责将质子、中子束缚成原子核。这部分强相互作用通常被称为剩余强相互作用(自然界中的分子力在本质上是一种剩余电磁相互作用)。弱相互作用描述微观世界中粒子的弱衰变以及弱产生过程,比如使自由中子通过 β 衰变转化为质子。弱相互作用是人类赖以生存的太阳发光的原动力。太阳中的核聚变开始于两个质子结合成一个氦核、一个正电子和一个电子中微子。按照相互作用强度来分,引力最弱,在微观世界可以忽略,而强相互作用最强。

物理学的一个重要目标是认识世界万物的最小组成单元及其相互作用。表1给出了目前已知的61种基本粒子,它们可以分为两大类,构成物质的费米子

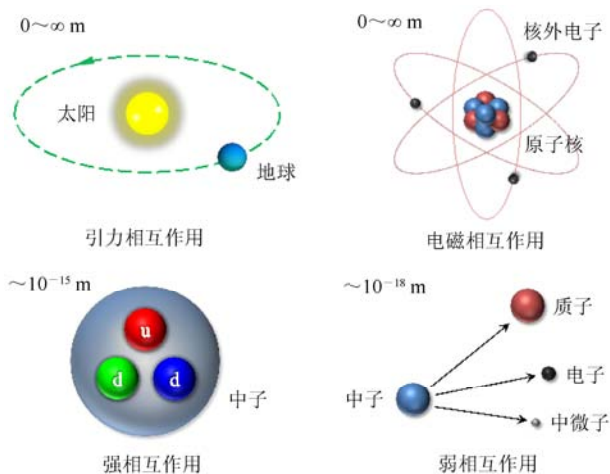


图1 自然界已知的四种基本相互作用及其力程(李凯文制图)

和负责传递相互作用的玻色子。按照参与相互作用的类型,费米子又分成夸克和轻子,其中夸克参与强相互作用、弱相互作用和电磁相互作用,而轻子只参与电磁相互作用和弱相互作用。玻色子负责传递各种相互作用,包括负责传递强相互作用的胶子、传递弱相互作用的W、Z玻色子以及传递电磁相互作用的光子。这样一个构建于强相互作用、弱相互作用、电磁相互作用以及上面提到的61种基本粒子的微观粒子模型通

表1 标准模型中的61种基本粒子。其中的三代夸克为(u, d), (c, s), (t, b); 三代轻子为(e, ν_e), (μ , ν_μ), (τ , ν_τ)。通常将夸克和轻子的种类、代数简称为“味”,即存在六味夸克和六味轻子。

		种类	代数	反粒子	颜色	总数
费米子	夸克	2	3	存在	3	36
	轻子	2	3	存在	无	12
玻色子	胶子	1	1	自身	8	8
	W	1	1	存在	无	2
	Z	1	1	自身	无	1
	光子	1	1	自身	无	1
	希格斯粒子	1	1	自身	无	1

常被称为基本粒子的标准模型。标准模型中的三种相互作用分别由量子色动力学 (QCD) 及温伯格-萨拉姆弱电统一模型来描述。2013 年, 标准模型预言的最后一个基本粒子——希格斯粒子 (Higgs) 被 CMS 和 ATLAS 合作组在位于欧洲核子中心 (CERN) 的大型强子对撞机 (LHC) 上进行的实验所发现。由于在 19 世纪 60 年代在粒子物理中首先引入并预言了希格斯粒子, 比利时物理学家弗朗索瓦·恩格勒特 (François Englert) 和英国物理学家彼得·希格斯 (Peter W. Higgs) 被授予了 2013 年诺贝尔物理学奖。

除了几小片“乌云”以外, 标准模型到目前为止对人类所居住的地球乃至宇宙的解释总体上是非常成功的。这几片乌云包括基本粒子质量的层次问题、正反物质不对称问题、中微子振荡、强 CP 破坏、暗物质、暗能量等。对这些问题的研究很有可能引发物理学继量子力学与狭义相对论之后的又一场革命。当然, 即便在标准模型框架内, 粒子物理学与核物理学研究还面临很多未解的问题。其中之一即是色禁闭问题。简单来说, 虽然标准模型认为质子、中子并不是基本粒子, 而是由夸克组成, 但自由夸克至今没有被观测到。由于夸克参与强相互作用, 有“色”自由度, 所以人们推测只有色单态的粒子才能被实验观测到, 而带色的自由夸克永远无法被实验直接观测。这个现象是通常所说的渐进自由的另一面。由于在 20 世纪 70 年代提出了强相互作用的渐进自由性质, 美国物理学家戴维·格罗斯 (David J. Gross)、戴维·波利策 (H. David Politze) 和弗兰克·维尔切克 (Frank Wilczek)

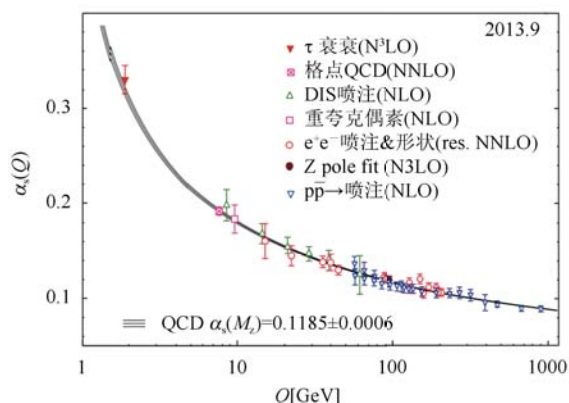


图 2 从不同实验提取的强相互作用耦合常数 α_s 随着相互作用能标的变化。取自粒子物理数据评论, Phys. Rev. D 86, 010001 (2012)

三人被授予了 2004 年诺贝尔物理学奖。图 2 给出了强相互作用中跑动耦合常数 α_s 的大小随着相互作用能标的变化。可以看到随着夸克-胶子间交换的能量越小 (距离越大), 夸克-胶子间相互作用变得越来越强。这就定性解释了为什么自由夸克无法被直接观测到。渐进自由性质导致在高能区量子色动力学可以通过通常的微扰论方法求解——即微扰量子色动力学 (pQCD), 并获得了巨大的成功。而在低能区, 较大的跑动耦合常数使得微扰论方法失效, 从而人们不得不借助于各种非微扰论方法理解强相互作用。

1974 年美国物理学家肯尼斯·威尔逊 (Kenneth G. Wilson, 1982 年诺贝尔物理学奖获得者) 在《物理评论 D》上发表了题为 *Confinement of quarks* 的论文, 提出了通过将四维时空离散化, 利用蒙特卡洛采样技术计算路径积分, 从而实现数值求解非微扰强相互作用的理论框架, 即格点量子色动力学 (又称格点 QCD、格点规范场论)。经过近三十年的发展, 特别是进入 21 世纪以来, 随着计算机计算能力的飞速提升以及相应算法的持续改进, 格点量子色动力学已发展成为物理学研究手段中除了传统的理论和实验之外的第三种手段, 即数值模拟。无独有偶, 2013 年诺贝尔化学奖被授予了美国科学家马丁·卡普拉斯 (Martin Karplus)、迈克尔·莱维特 (Michael Levitt) 及亚利耶·瓦谢尔 (Arieh Warshel), 表彰他们在“发展多尺度模型研究复杂化学体系”上的贡献, 凸显了基于第一原理的数值模拟在化学研究中日益突出的重要地位。第一原理计算通常指基于所研究系统的最基本组成单元及已知基本相互作用, 不引入任何唯象 (或者经验) 模型、参数的理论或数值计算。对于本文讨论的非微扰强相互作用系统, 第一原理为量子色动力学, 而第一原理计算即指基于夸克、胶子自由度及量子色动力学的理论、数值计算。

2. 格点量子色动力学

简单地说, 量子色动力学是一个用来描述夸克、胶子间强相互作用的量子场论, 而格点量子色动力学为求解非微扰量子色动力学提供了一种数值解法。其基本思路是: 1) 将无限大四维时空简化为一个体积为 $V_4 = L_s^3 \times L_t$ 的四维盒子, 其中 L_s 为空间维度的长

度, L_t 为时间维度的长度; 2) 将四维盒子离散化, 其中空间维度分割成 N_s 份, 格点间距为 a_s ; 时间维度分割成 N_t 份, 格点间距为 a_t 。该图像与固体物理中晶格的图像非常相似。3) 与晶格中格点 (sites) 处为原子不同, 在格点量子色动力学中, 格点处是夸克场, 而胶子场被定义在连接相邻夸克的规范场链 (link) 上。有限的格点间距提供了一个自然的长度 (能量) 截断。因而与连续场论不同, 格点量子色动力学不存在发散问题。图 3 在三维空间内给出了格点量子色动力学模拟中的一些关键元素。

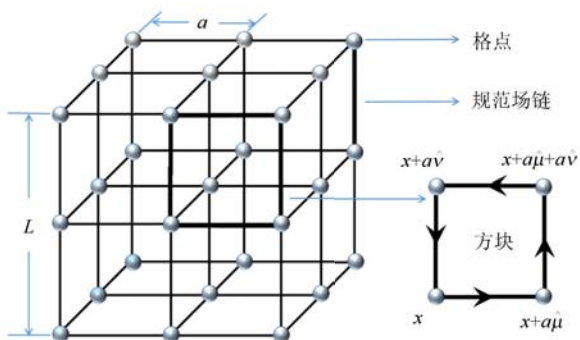


图 3 格点量子色动力学的三维晶格结构 (实际为四维) 及基本元素, 格点、规范场链、方块 (任修磊制图)

格点量子色动力学的主要目的是计算如下的路径积分:

$$\langle 0|O|0\rangle = \frac{\int [d\psi][d\bar{\psi}][dU] O[\psi, \bar{\psi}, U] e^{-S_{\text{QCD}}}}{\int [d\psi][d\bar{\psi}][dU] e^{-S_{\text{QCD}}}},$$

其物理含义为各种物理量 O (包括真空) 的期待值或观测值, 积分遍历夸克场 ψ 、反夸克场 $\bar{\psi}$ 和规范场链 U 在四维时空的所有可能取值, 积分权重为 $e^{-S_{\text{QCD}}}$, 其中 S_{QCD} 为 QCD 作用量。上面的积分虽然看上去简单, 但如果不利用蒙特卡洛重点采样方法, 却是一个几乎不可能完成的任务。在只考虑胶子自由度的情况下, 假设取 $N_s=10$, $N_t=10$, 则在四维盒子中共有 $10^3 \times 10 = 10^4$ 个格点, 每个格点有四个与之相连的规范场链, 总的规范场链数为 4×10^4 。由于存在红 (r)、蓝 (b)、绿 (g) 三种色荷, 每个场链由一个描述色自由度的、有 8 个参数的 $SU(3)$ 矩阵表示, 因而总的积分维度为 $8 \times 4 \times 10^4$ 。为了数值计算这样一个 32 万维的积分, 在最极端的情况下, 假设每个维度上一个两点求和公式来近似真实积分, 总的求和项数为

$2^{320000} \approx 4 \times 10^{96329}$ 。这个数目是如此的巨大, 以至于这样一个求和过程永远无法实现。目前世界上最快的超级计算机, 中国的天河二号, 每秒能够进行浮点运算的次数为 33.86 千万亿次, 即每年能够进行的浮点运算约为 10^{24} 次。如果该计算机全部用来计算上面的积分, 需要 $4 \times 10^{96329} / 10^{24}$ 年才能完成, 而宇宙的年龄也只有 1.37×10^{10} 年 (137 亿年)。

如上面的分析所示, 通常的数值积分方法 (如牛顿-科茨法、辛普森法则等) 在求解高维积分时, 计算量会随着积分维度的增加指数增加, 造成所谓“维度灾难”。而蒙特卡洛方法在计算高维积分时, 计算量不会随着维度显著增加, 所以被格点量子色动力学模拟广泛采用。蒙特卡洛方法又被称为“统计模拟方法”或“随机抽样技术”, 其理论基础是概率和统计理论。该方法于 20 世纪 40 年代由美国“曼哈顿计划”成员斯塔尼斯拉夫·乌拉姆 (Stanislaw Ulam) 和著名数学家、有计算机之父之称的冯·诺依曼 (John von Neumann) 提出, 而后冯·诺依曼又以赌城摩洛哥的蒙特卡洛 (Monte Carlo) 为其命名。目前在很多科学计算领域中都有广泛的应用, 如计算物理学、金融工程学等。即便是采用蒙特卡洛方法, 由于格点 QCD 模拟中涉及的积分维度是如此之高, 积分的精确求解还是需要借助目前世界上最快的超级计算机。

上面我们只谈到了路径积分中玻色子 (胶子) 的贡献, 还没有涉及费米子 (夸克) 的贡献。与胶子的贡献相比, 处理夸克的贡献的难度更大, 涉及费米子翻倍 (fermion doubling)、手征对称性恢复等诸多难点, 截止目前仍是一个研究热点。感兴趣的读者可以参考最新的研究文章。值得指出的是, 在格点量子色动力学早期的研究中, 通常忽略海夸克的贡献, 即所谓的淬火近似 (quenched approximation)。进入 21 世纪以来, 随着计算机计算能力的迅速提高, 考虑海夸克影响的格点量子色动力学模拟已渐渐成为主流。

格点量子色动力学模拟作为一个基于第一原理、模型无关的数值方法, 其物理输入量与量子色动力学相同, 即跑动耦合常数, 夸克质量, 以及描述 CP 破坏的相位 θ (大部分计算中取为 0), 当然其作为一个数值模拟其还依赖于格点体积及格点间距。在时间

和空间维度的格点间距取为相等的情况下, $a_s=a_t=a$, 格点量子色动力学模拟所需要的计算资源与格点间距、轻夸克质量存在如下正比关系:

$$\text{cost} \propto \left(\frac{L}{a}\right)^4 \frac{1}{m_\pi^2 a^2}$$

其中 $m_\pi^2 \propto m_u + m_d$ 。随着格点间距以及轻夸克质量的减小, 在计算资源固定的情况下, 计算时间会迅速增长。因此, 大部分模拟采用比物理值大的轻夸克质量, 有限的格点体积和格点间距。为了得到模拟物理量的真实值, 必须将格点模拟结果延拓到真实的物理空间, 这就需要借助于各种有效场论, 如手征微扰理论。

3. 超级计算机与格点量子色动力学

从上面的介绍可以看到, 格点量子色动力学模拟的计算涉及高维积分(胶子部分)及高维矩阵求逆(夸克部分), 因而对计算资源的需求是巨大的。超级计算机是格点量子色动力学模拟最常采用的计算工具。顾名思义, 超级计算机与人们所熟知的计算机相似, 只是比普通计算机运算速度更快或者内存更大。超级计算机被广泛用于科学研究、金融、国防、天气预报、地质勘探等诸多领域, 是一个国家综合实力的体现。近年来, 我国在这方面的研究取得了令人瞩目的成绩。据 TOP500 科技网站的资料, 目前中国的天河二号超级计算机, 以每秒 33.8 千万亿次每秒的浮点运算速度, 力压美国的“泰坦”、“红杉”以及日本的“京”超级计算机, 在 2013 年 11 月的全球超级计算机 500 强榜单上蝉联世界上最快的超级计算机称号。此外, 中国拥有的超级计算机总数排名第二(63 台), 领先于日本(28 台), 英国(23 台), 法国(22 台)以及德国(20 台), 仅少于美国(265 台)。

超级计算机主要通过采用多达数十万个多核 CPU(中央处理器)并采用 GPU(图形处理器)硬件加速的办法来提高运算速度。其中美国英特尔公司生产的 CPU 为大多数超级计算机所采用, 而美国英伟达公司生产的 GPU 更受欢迎。构造一台超级计算机并不是简单的将上万个 CPU 核心堆叠在一起, 高效的内部网络互联技术、低延迟、低能耗是衡量超级计算机性能的关键。我国的天河二号在这方面取得了重要进展。

目前在格点量子色动力学模拟方面投入计算资源较多的国家主要为美国、欧洲、日本等发达国家。例如美国的 USQCD 合作组拥有的专用计算资源大约为 200 Teraflop.Year(即每年能够进行的浮点运算约为 $200 \times 365 \times 24 \times 3600$ 万亿次)、日本的 PACS-CS 合作组为 14.3 Teraflops.Year, 而欧洲的 BMW 合作组为 82.5 TeraFlops.Year。虽然在专用计算资源上与发达国家不可同日而语, 以中国格点 QCD 合作组(CLQCD Collaboration)为代表的中国物理学家还是做出了很多重要的研究成果。例如, 近期 CLQCD 合作组在物理评论快报上连续报道了其对于 J/ψ 辐射衰变到标量和张量胶球的研究。

4. 格点量子色动力学研究冷核物理的最新进展

前面提到, 格点量子色动力学方法的提出为在低能区求解非微扰强相互作用提供了一种模型无关的第



图4 德国 Juelich 超算中心的 IBM Blue Gene/P 超级计算机, 浮点运算峰值为 1 千万亿次每秒。其中 IDRIS/CNRS 51.5 万亿次的计算资源供格点量子色动力学模拟专用(BMW 合作组)

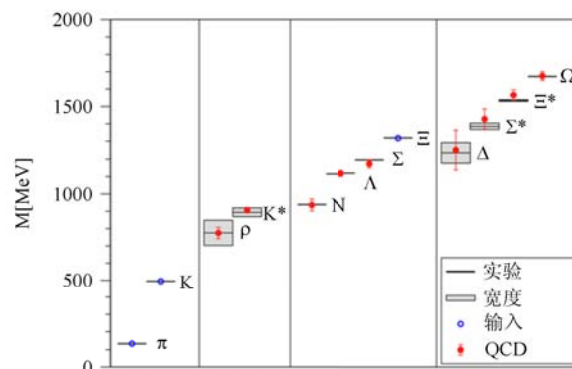


图5 欧洲 BMW 合作组计算的基态强子质量, 包括基态赝标介子八重态、矢量介子九重态、基态重子八重态、十重态。取自 Science 322:1224-1227,2008, arXiv:0906.3599

一原理方法。近年来，在研究强子质量谱、夸克禁闭、高温高密 QCD、胶球性质、CKM 物理、重味夸克物理等均取得了很多重要的成果。由于篇幅关系，下面我们简单介绍一下格点量子色动力学模拟在研究核子的性质、核子-核子相互作用以及轻核质量等方面的最新进展。管中窥豹，希望引起读者对该领域研究的关注。

4.1. 从第一原理出发计算核子质量

质量是物质的最基本属性之一，可以通过惯性质量和引力质量来引入。广义相对论证明了惯性质量与引力质量的等价性。长期以来，人们一直试图理解质量的由来，即试图利用相互作用来导出质量，这些探索基本上都以失败而告终。普通物质最终由夸克、胶子、电子组成，因而如果知道了夸克、电子的质量来源（胶子无静止质量），也就知道了普通物质质量的来源。在标准模型的框架内，夸克、电子质量由希格斯机制给出。2013 年希格斯粒子在大型强子对撞机上的发现，似乎表明人类已经理解了普通物质的质量来源。然而，希格斯机制只给出了流夸克和电子的质量，我们知道，由于色禁闭，自由夸克不存在，因此理解可见宇宙的质量就归结于理解构成可见宇宙的最小可观测单元质子和中子（统称为核子）的质量。核子的质量约为 $940 \text{ MeV}/c^2$ ，而组成核子的三个流夸克的质量只有 10 到 $15 \text{ MeV}/c^2$ 。因而希格斯机制只能解释核子质量的一小部分，其主要部分必须通过求解量子色动力学来解释。由于量子色动力学无法微扰求解，所以长期以来对这个问题的研究都没有取得实质性的进展。近年来，2+1 味格点量子色动力学的计算取得了突破性进展。如图 5 所示，欧洲 BMW 合作组 2010 年发表在《科学》杂志上的计算结果已经达到了 1% 的精度，从而首次定量地解释了核子的质量起源，即可见宇宙的质量来源（现代宇宙学研究成果表明，人类所生活的宇宙只有大约不到 5% 为由原子核、电子、中微子、光子等构成的可见物质，剩余部分为暗物质和暗能量。其来源在今后很长时间内将是粒子物理及宇宙学研究的前沿问题。我们这里只讨论普通物质）。

4.2. 从第一原理出发计算核子-核子相互作用

1911 年卢瑟福 (Ernest Rutherford, 获 1908 年

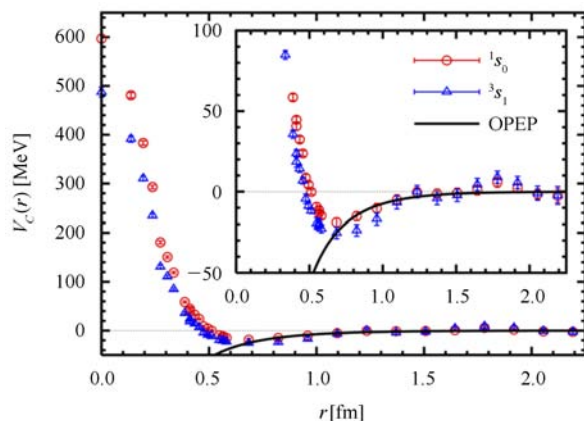


图 6 格点量子色动力学模拟得到的自旋单态 (1S_0) 和自旋三重态 (3S_1) s 波核子-核子相互作用中心力部分随着核子间距离的变化。其形式定性再现了唯象核力的基本图像，即长程吸引，中程饱和，短程排斥。取自 *Phys.Rev.Lett.* 99 (2007) 022001, e-Print: nucl-th/0611096

诺贝尔化学奖) 发现原子核、1919 年发现质子，查德威克 (James Chadwick, 获 1935 年诺贝尔物理学奖) 1932 年发现中子后，海森伯 (Werner Karl Heisenberg, 获 1932 年诺贝尔物理学奖) 和伊凡宁柯 (Dmitry Ivanenko) 提出了原子核是由质子和中子组成的物理图像。长期以来，人类一直试图理解核力（剩余强相互作用）是如何将质子、中子束缚在原子核这样一个狭小的空间内的。1935 年，日本物理学家汤川秀树 (Hideki Yukawa, 获 1949 诺贝尔物理学奖) 提出了核力可以用核子间交换 π 介子来解释。1947 年，美国物理学家鲍威尔 (Cecil Frank Powell, 获 1950 年诺贝尔物理学奖) 及其合作者从宇宙线中发现了 π 介子，质量与汤川秀树的预言一致，验证了 π 介子交换猜想的正确性。现代基于介子交换图像的唯象核力可以非常精确地描述核子-核子散射数据及通过从头计算方法预言轻核的性质。然而，我们知道核力只是一种剩余强相互作用，而核子由夸克和胶子组成，那么是否有可能从夸克、胶子自由度出发来得到核力的具体形式呢？格点量子色动力学模拟近几年来在这个领域的研究取得了巨大进展。日本理化学研究所和东京大学的物理学家的研究表明，利用格点量子色动力学模拟计算出来的核力与通过拟合实验数据得到的核力在定性上是一致的 (图 6)，这就首次从第一原理出发验证了近一个世纪以来人们对核力的唯象认

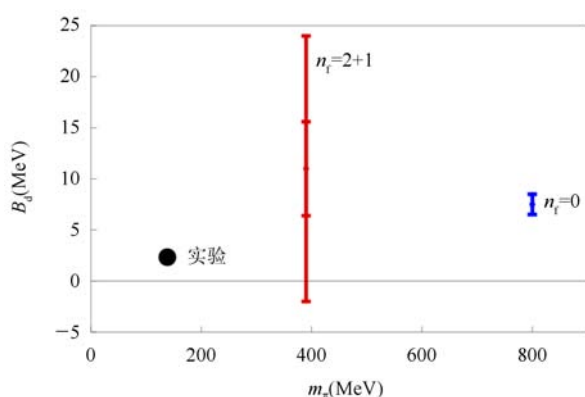


图7 格点量子色动力学计算得到的氘核的结合能。横坐标为 π 介子质量（自然单位制、光速 $c=1$ ）。取自 *Phys. Rev. D* 85, 054511(2012), arXiv:1109.2889

识。该研究成果入选英国《自然》杂志2007年21个研究亮点 (*Research Highlights*) 之一。需要提到的是，当前的格点量子色动模拟所采用的轻夸克质量还远大于其物理值，因而所得到的核力还不能与经验（唯象）核力做定量的比较。

4.3. 从第一原理出发计算轻核的性质

理论上，可以直接从夸克、胶子自由度出发来计算原子核的性质。日本的PACS-CS以及美国的NPLQCD合作组近年来在这方面开展了很多工作，计算了如氘核、氦-3、氦-4（ α 粒子）等 $A \leq 4$ 轻核的质量。前面提到，为了减小数值模拟所需的计算资源，格点量子色动力学模拟通常采用比物理值大的轻夸克质量。比如，图7所示的模拟所采用的 π 介子质量约为400 MeV，远大于其物理值138 MeV，虽然

已经可以得到束缚的氘核，但是其结合能要大于实验值。（研究表明： π 介子质量与轻夸克质量之间存在简单的正比关系。在其他条件不变的前提下，采用物理轻夸克质量的格点量子色动力学模拟应该能够给出 π 介子的物理质量。）对于 $A \leq 5$ 的原子核，随着涉及价夸克自由度的增加，构建多重子系统关联函数的成本成指数增加，所需的计算资源是天文数字，从而使得模拟计算非常昂贵以致无法实现。因此，如何系统地减小构建多重子系统关联函数的成本成为亟需解决的问题。目前，这方面的研究已经取得了一些进展。此外，近年来，德国科学家与美国科学家利用格点有效场论，基于手征微扰理论计算的核力和核子、介子自由度，对轻核的研究也取得了可喜的进展，目前已经可以计算到 ^{28}Si 。

5. 展望

利用格点量子色动力学方法，基于夸克和胶子自由度，研究冷核物理问题虽然刚刚起步，但已经取得了一些令人振奋的结果。相信在不久的将来，随着计算机运算速度的进一步提高以及算法的持续优化和改进，格点量子色动力学数值模拟有望为核物理研究提供实验和理论之外的第三种独立研究手段。这些进展不仅对验证标准模型，寻找超标准模型物理出现的迹象具有重要意义，而且对极端丰中子、丰质子原子核的研究，核技术应用等都将产生深远的影响。希望在这些新的进展中能够看到更多中国物理学家的贡献。

封底照片说明：

2014年2月8日，在南极大陆广袤的雪域，在位于东南内陆的伊丽莎白公主地区，一座外形酷似中国传统红灯笼的建筑伫立在南极白色的冰盖上，显得十分的耀眼。这就是我国继长城站、中山站、昆仑站之后的第4个南极科学考察站——泰山站。该站是南极内陆度夏站，于2013年年底开工，总面积1000 m²，内部设施完善，可提供20人生活居住。考察站还设计有飞机跑道，设计使用寿命15年。泰山站海拔2621 m，位于中山站与昆仑站之间，在海拔高度上与

昆仑站遥相呼应。它既可作为昆仑站的后勤保障之所，还能以此为平台，对南极格罗夫山地区的科学考察提供支撑。科学家们将在这里主要进行电离层、气象、地磁、高层大气物理、环境等学科的常年观测，同时开展地质、冰川、地貌、生物、人体医学等学科的考察和研究，并进步拓展在南极科考的范围。目前有20多个国家在南极共建了150多个科学考察站，分为常年考察站、夏季考察站、无人自动观测站三种。

（李之 / 供稿）