

编者按:近一年来,《现代物理知识》编辑部一直在筹备以本刊2021年出版的“庆贺李政道先生九十五华诞专刊”文章为基础,编写《李政道与中国科学》一书。2024年8月4日,著名物理学家李政道先生逝世,学界纷纷缅怀一代大师。从本期开始,我们将专门为《李政道与中国科学》补充约稿的几篇文章,在杂志上陆续刊登,以示对先生的深切悼念。

李政道先生与芯片上的格点量子色动力学

刘 川

(北京大学 100871)

2024年8月4日,李政道先生仙逝,享年97周岁。一段时间以来,多家媒体发表了对李先生的纪念文章。大家追忆李先生的往事,感念他为中国的科学、教育事业所作出的重大贡献。我曾受益于李先生推动并促成的“中美联合培养物理类研究生计划”(CUSPEA),与李先生有更深一层的联系;我的物理研究方向——格点量子色动力学——也是李先生曾经十分看重的一个粒子物理领域。因此,也借此文将他在格点量子色动力学及其数值计算方面所做的事情做一个回忆。我比李先生要晚了至少两辈,因此许多早年(主要指20世纪80年代和90年代)的事情并非亲身经历,而是根据后续的相关文献整理所得,恐难免会有出入。但我还是尽量忠实地将这些过程描述出来,以表达对李先生的感谢和纪念。若有不妥之处,敬请各位相关专家和读者订正。

本文的标题涵盖两个方面,一个是格点量子色动力学,另一个是芯片,它们各自涉及格点量子色动力学这个物理学特殊的子方向的两个非常重要、同时又是互补的侧面:首先它是一种理论研究方法;其次它还是具体的研究手段。下面,我们将看到,李政道先生在这两个方面都展现出了超前的洞察力,并作出了实质性的贡献。他对于格点量子色动力学的启发和贡献不仅仅限于中国,对于全世界范围内该学科的发展也起了举足轻重的作用。

1. 李先生对格点量子色动力学发展的影响和贡献

首先有必要稍微介绍一下格点量子色动力学(又称为格点规范场论),与李先生所主要研究的粒子物理之间深刻的联系。我们现在知道,自然界中四种基本相互作用中的三种,具体来说就是强作用、弱作用和电磁作用,都可以和谐地统一在粒子物理的标准模型的理论框架之下。标准模型诞生于1974年,其中与电弱相互作用相关的组成部分——电弱统一模型其实就构建于李政道和杨振宁先生1956年发现的弱作用宇称不守恒^[1]的基础之上,是一个手征规范理论:该理论中费米子的左手和右手部分与规范场的耦合是截然不同的。标准模型的另外一部分则是描写强相互作用的量子色动力学(quantum chromodynamics, QCD)——它在形式上类似于电磁作用的基本理论,即量子电动力学(quantum electrodynamics, QED),但却展现出截然不同特性。QCD中费米子左右手分量与规范场的耦合是相同的,但却在低能区展现出强烈的非微扰特性。

虽然粒子物理标准模型大的理论框架在20世纪80年代初已经大致清晰,但其中涉及强相互作用的部分则遇到了前所未有的挑战。在强作用的低能区域,强相互作用极强,远强于电磁作用,这使得以往物理学家所熟知的微扰论的方法——这对于量子电动力学异常成功——完全无法运用。比如,

质子和中子虽然由夸克组成,但是其组成的成分夸克从未被单独分离出来,它们总是被禁闭在质子或中子内部——这称为色禁闭。这就是我们称为非微扰性质的困难。这个困难可以说一直伴随着20世纪和21世纪的物理学。直到今天,物理学家仍然在努力探索以克服这个困难。

在1974年,美国物理学家Ken Wilson提出了格点量子色动力学(格点QCD)的理论方法^[2]。它是将所研究的量子场——包括夸克场、反夸克场和规范场——分立化到四维欧氏空间的格点之上,这样可以在费曼路径积分的框架下非微扰地定义量子色动力学。到20世纪80年代初,美国的另一位物理学家克罗伊茨(M. Creutz)在若干个格点规范理论中^[3],首次尝试了在大型计算机上利用数值模拟来非微扰地计算SU(2)理论中的物理量。当然,囿于当时的计算能力的限制,这些计算仅仅能够演示一下基本的逻辑思路,还完全不能像今天这样,真正产生与实验结果直接可对比的成果。

对于格点量子色动力学这个当时全新的研究方向,李政道先生展现出了作为顶级理论物理学家过人的敏锐和超前的洞察力。他当时就意识到这是一个极具发展潜力的研究方向。从他后续的研究来看,他当时的关注点主要集中在格点量子色动力学的两大方向之上:一个是比较理论化的问题,即如何处理格点上由所谓的Nielsen-Ninomiya定理^[4,5]引起的费米子加倍问题;另一个则是非常实际的问题,即如何利用大型计算设施非微扰地计算各种强子的物理性质。李先生非凡的敏锐和超前的洞察力是由后续40余年的物理学发展所证明的。格点量子色动力学上述两个基本问题,一直到今天仍然是困扰相关物理学家的关键问题。换句话说,这两个问题一直引导着相关的研究者长达40余年。要知道在20世纪的80年代初,我们对于粒子物理标准模型的信心和理解还远没有像今天这样的完善:至少当时标准模型中的很多基本粒子在实验上还没有被发现和证实。但作为一名杰出的理论物理学家,李先生在这一点上的确展现了令人钦佩的

超前洞察力。事实证明,他当时关注的这些物理问题一直到今天仍然是粒子物理研究的热点问题。本文中笔者只是以格点量子色动力学为例来说明了这一点;李先生在物理学其他方向上展现出前瞻性的例子还有不少,比如李先生关于相对论性重离子碰撞和QCD相变问题的关注、还有他对于中微子质量问题的关注,等等。关于这些其他的方面,读者可以参考其他的回忆文章,我在这里就不再赘述了。

针对第一个理论性问题,李先生和他的长期合作者R. Friedberg,还有当时仍然是年轻教师的Norman Christ,立刻投入该方向的研究。针对格点场论体现出来的费米子加倍问题——这个问题阻碍了将格点场论的非微扰理论方法应用于弱相互作用这类左右手不对称的规范理论之中——他们提出了著名的随机格点(random lattice)的理论框架。他们在1982年发表的三篇论文^[6-8]迅速成为了这个新兴方向研究中的热门话题。虽然随机格点的理论框架后来被发现并不能简单地解决费米子加倍的问题,但该研究也揭示了这个理论问题的深刻性和复杂性。实际上近年来又有不少研究者重新考察随机格点的可能性。而如何非微扰地定义手征规范理论的问题,至今仍然是粒子物理和量子场论学界没有获得彻底解决的重大难题之一,有兴趣的读者可以参考相关文献^[9]。

除了上述深邃的理论问题具有洞察力外,李先生还对强作用的数值计算非常重视。这就涉及将计算机数值模拟计算应用于强相互作用的问题了。前面曾提及,20世纪80年代是格点量子色动力学发展的早期起步阶段。在那时候,即使是美国这样在计算机硬件方面已然走在全世界最前列的国家,其所谓的超级计算机(当时称为并行计算机)的数值计算能力也是十分有限的。当时能够从事数值模拟的物理研究人员也是屈指可数。换句话说,当时计算机的计算能力和物理学家所期望能够计算的相距甚远。这就使得当年真正能够进行的计算往往距离物理情况相距甚远。格点量子色动

力学的计算基本上仍处于一个“模型演示”阶段。

虽然如此,但李先生仍然看好这个与计算机数值模拟联系紧密的方向的未来。作为项目的负责人,他亲自带领美国哥伦比亚大学物理系的研究人员投入到专用于格点规范理论计算的高速超级计算机研制工作中。1982年至1988年间,哥伦比亚大学建造的2维网状计算机系列中,最快的一个的峰值速度为160亿次浮点运算/秒(这在今天看来,大约只相当于目前若干台PC的计算能力,但在80年代初,这计算能力被视为天文数字),运算格点量子色动力学时的持续速度达到65亿次浮点运算/秒。为了实现这个目标,他极力鼓励以N. Christ为代表的哥伦比亚大学的同仁与各芯片厂家合作,积极研制适用于格点计算的专用芯片。这一举措实际上是一个完全改变传统的理论物理学的大胆的决定。事实上,从那时候到现在的科学发展证明,大型计算机的引入不仅仅改变了物理学,而且深刻地改变了整个科学的版图和工作模式。在今天看来,由于计算机的深层介入,目前的物理学研究范式已经从几十年前传统的理论物理和实验物理的两级划分模式过渡到了理论物理、实验物理和计算物理的三分天下的研究方式。李先生是典型的传统理论物理学家,本人并不做具体的数值计算;但是他在80年代就洞察到这个新兴方向的巨大潜力以及它将改变未来科学研究的可能性,这是非常令人钦佩的。

大规模的数值模拟的介入,意味着原先从事传统理论物理研究的科学家需要像实验物理学家那样,去努力构建和优化适合自己计算问题的芯片和计算机。因此也需要一个具有一定规模的合作组,大家共同合作努力。这正是哥伦比亚格点合作组当年所开启的事业。我今天还清晰地记得,在20世纪90年代初我开始参加国际格点年会的时候,哥伦比亚格点合作组每年都会在机器与算法的分会上展示他们最新的计算机研制进度;虽然多年间并没有真正与实验可对比的物理结果,但是这些着重于机器与算法方面的研究对于格点量子色动力学这

个高度依赖于计算资源的方向而言,仍然是十分关键的。现在回过头来看就不难发现,当年这段筚路蓝缕的历程是多么地难能可贵。

从20世纪80年代起,一直经历整个90年代到本世纪初,经过20余年的不懈努力,在李先生的倡导和带领下,哥伦比亚格点合作组终于成功地搭建多台高效的、适用于格点计算的专用机器。恰逢这些年中,计算机的数值计算能力会随着芯片的能力的提高遵循所谓的摩尔定律,即其计算能力随时间有一个指数的增长。与此同时,格点量子色动力学相关的数值算法的研究也日渐成熟。这些效果的积累到21世纪初,格点量子色动力学已经可以不断产生真正可与实验对比的物理结果了。在21世纪初,RBC(Riken-Brookhaven-Columbia)合作组宣告成立。利用哥伦比亚格点合作组多年的积累——这包括强大的计算资源的研究和成熟的算法的研究——RBC合作组攻克了强相互作用中很多著名的物理难题;这些问题涉及CP破坏、QCD相变等多个相关领域;而以Norman Christ教授为代表的哥伦比亚格点合作组也成为了格点量子色动力学界最著名的合作组之一。

另外值得提及的一点是,李政道先生早在20世纪80年代就积极倡导与科技公司合作,这不仅仅催生了物理学中的新的研究方向——格点量子色动力学,也反过来极大地促进了超级计算机芯片本身的研制。在2005年,为了表彰李政道先生在蓝色基因/L(Blue-Gene/L)先导计算机开发过程中做出了重要贡献,IBM公司特地在李政道教授80寿辰之际,向他专门赠送了一块蓝色基因/L计算机卡(图1)。

2. 李先生对中国格点量子色动力学发展的影响

前面一部分提及的主要是在国际范围上,李政道先生对格点量子色动力学学科的重视和他对其的贡献。下面介绍一下我所了解的李先生对我国的格点量子色动力学发展的影响。



图1 IBM公司在李政道教授80寿辰之际,向他赠送一块蓝色基因/L计算机卡

就中国格点量子色动力学这样一个具体的新兴学科而言,李先生的贡献和影响仍需放在当时中国科学——特别是粒子物理学——发展的大背景之下进行考察,这也是李先生对中国科学和教育发展的众多重要贡献中的一环。

20世纪80年代初的中国在结束了十年的特殊历史时期之后,开启了改革开放的进程。与此同时,我国的科学事业也迎来了科学的春天。我国与国际学术联系也逐渐开启。鉴于国内的多数粒子物理的学者对当时已经逐步成熟的标准模型的内容并不了解,李先生在他早期的几次回国期间,专门亲力亲为地介绍了这些相关的内容,以使国内的学者们尽快接触到这些前沿国际进展。在他的建议下,还建立了CUSPEA制度——我正是通过该项目于1988年赴美留学并最终投身到格点量子色动力学的研究之中的。

为了促进刚刚开启的国际交流,1986年10月,李先生在北京创立了中国高等科学技术中心(CCAST),并担任其终身主任。1987年,高等科学技术中心首次举行学术年会,李先生当时确定的会议主题就是“用并行机的格点规范理论”。这个选择充分体现了李先生对于新兴方向格点量子色动力学的高度重视。他不仅将其选为第一次年会的主题,他还亲自创作了该年会的主题画,参见图2。

李政道先生以他所在的哥伦比亚大学当时用于格点计算的并行机的线路图为背景,并在中心写下一个大大的“格”字。这张图是他对“海报也可以成为艺术品”这一设想的首次尝试。在今天看来,这的确是一个相当超前的当代艺术作品。在中文中物理又被称为格致——取其格物致知之意。因此,“格”这个字既包含了整个物理学,同时也体现了格点这个新兴的方向,一字双意;其背景则选为线路图则充分说明了这是一个依赖于计算机数值计算的新兴方向。

前文曾提及,即使在计算资源相对丰富的美国,在20世纪80年代和90年代,通常的计算机都无法胜任非常接近实际物理的格点计算。在改革开放之初计算资源更加匮乏的中国,这种困难就更加突出了。当时国内较大的计算机主要用于国防方



图2 李政道先生为第一次CCAST学术年会所做的海报。会议的主题是“用并行机的格点规范理论”

面的计算需要,并不对基础研究开放。我现在清晰地记得,当年我在北京大学读本科时(1984~1988)也有数值计算方面的课程,但所用的计算机是非常简陋的。即使到了20世纪90年代末,可用于基础科学研究的计算机也多以IBM个人电脑这类为主,完全无法胜任真正的格点数值计算。虽然如此,CCAST首届的学术年会让当时国内很多的学者了解到了格点量子色动力学(或按照当年的称呼为格点规范)这个方兴未艾的学术方向。我国第一代从事格点规范研究的学者几乎都受到CCAST的这次重要学术活动的影响和驱动。这对后来中国格点量子色动力学的发展起到了非常关键的启蒙作用,播下了一颗重要的火种。李政道先生还联系购买了大型工作站等中国当时无法提供的设备。这些当时的超级计算机向全国科研人员提供免费使用的权利,为促进中国的科研工作作出了巨大的贡献。

我1996年回国工作后,国内可以用于基础科学的计算资源相较于20世纪80年代已经有了极大的改善。因此,我当时深感应当努力将数值模拟计算的工作开展起来。格点量子色动力学方向的特点是,仅仅进行纯解析理论方面的研究很难有所推进。为此,2005年我与当时国内从事格点量子色动力学的诸位年轻学者一道,倡议成立了中国格点合作组(China Lattice QCD, CLQCD)。我们在充分运用当时国内已有的计算资源的同时,努力去寻找并利用较大规模的计算资源。这些努力经过多年的积累有了初步的效果:我们完成了一系列有一定影响的研究工作,还培养了一批从事格点量子色动力学的、更加年轻的学者,其中后者显得尤为重要。我国还在2009年和2019年分别在北京大学和华中师范大学成功举办了两次国际格点年会,扩大了我国格点量子色动力学研究和CLQCD合作组在国际上的影响。

国内超级计算机资源的大幅度改善始于2015年左右。标志性的事件是2016~2017年我国自主研制的“太湖之光”计算机连续两年获得世界500强超

级计算机排名之首,其顶级运算速度达到了12.54亿亿次/秒。国产超算的迅速发展使得我们看到了大力发展格点量子色动力学的契机。但是顶速的排名是一回事,将国产超算运用于具体的科学研究则还有相当多的工作需要完成。国产超算作为通用性的科学计算设备起步比较晚,相应的软件适配环境也比较薄弱。这意味着我们需要针对不同的科学研究问题开发相应的软件并将其优化。也就是说,我们需要仿照上面提及的哥伦比亚格点合作组20世纪80~90年代的做法,不断优化我们的计算模式。与此同时,由于国际局势的变化,某些国家开始对我国的芯片实行禁运政策。对于格点量子色动力学这个非常依赖于大规模数值计算学科,上述两方面因素给中国的相关研究带来了相当严峻的挑战。当然,国产超算的发展并没有因此停滞,中国的格点量子色动力学的发展也并没有停滞。我们都在共同努力,力争拿出基于中国自主计算资源的解决方案——这既包含了纯粹的计算方案,也包含了相应的量子色动力学研究的物理结果。得益于近年来国家基金委和科技部的大力支持,CLQCD的同仁们与我国的各个超算中心正在积极合作努力之中。与此同时,由于目前格点量子色动力学的计算已经有不少可以与实验直接进行对比,我们也加大了与粒子物理核物理实验的合作。因此,基于芯片上的格点量子色动力学就是一个与粒子物理/核物理实验和超级计算机发展高度交叉和融合的一个方向。我们相信,通过我们不懈的努力,也一定能够将中国的格点量子色动力学发展好。

本文通过对历史的回顾,分别从国际和国内两个侧面介绍了李政道先生对格点量子色动力学的贡献及其深远影响。李先生作为具有卓越远见的科学家对我国的科学和教育事业都作出了巨大的贡献,而本文只是以格点量子色动力学这个李先生非常重视的方面发展的历史来阐明这一点。李先生曾经说过:“整个中华民族就是一个人,是世界最大的人,是历史上最大的人,也是将来最大的人。”作为在中国从事格点量子色动力学的晚辈,

我们中国格点合作组的所有人都有责任将中国的格点量子色动力学发展好,争取能够成为“将来最大的一个人。”

参考文献

- [1] Lee T.D. and Yang C.N., Question of parity nonconservation in weak interactions, Phys. Rev. 104, 254, 1956.
- [2] Wilson Kenneth G., Confinement of quarks, Phys. Rev. D 10, 2445, 1974.
- [3] Creutz M., Monte Carlo Study of Quantized SU(2) Gauge Theory, Phys.Rev.D 21, 2308, 1980.
- [4] Nielsen H. B., Ninomiya M., Absence of neutrinos on a lattice: (I). Proof by homotopy theory, Nucl. Phys, B185, 20, 1981.
- [5] Nielsen H. B., Ninomiya M., Absence of neutrinos on a lattice: (II). Intuitive topological proof, Nucl. Phys, B193, 173, 1981.
- [6] Christ N.H., Friedberg R., Lee T.D., Random Lattice Field Theory: General Formulation, Nucl.Phys.B 202, 89,1982.
- [7] Christ N.H., Friedberg R., Lee T.D., GAUGE THEORY ON A RANDOM LATTICE, Nucl.Phys.B 210, 310, 1982.
- [8] Christ N.H., Friedberg R., Lee T.D., Weights of Links and Plaquettes in a Random Lattice, Nucl.Phys.B 210, 337, 1982.
- [9] Kaplan D. B. and Sen S., Weyl Fermions on a Finite Lattice, Phys. Rev.Lett. 132, 141604, 2024.



她用物理的情趣,引我们科苑揽胜;
她用知识的力量,助我们奋起攀登!

欢迎投稿,欢迎订阅

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

科技创新、科学普及是实现创新发展的两翼。《现代物理知识》旨在普及科学知识、弘扬科学精神,设有物理知识、物理前沿、科技经纬、科学源流、教学参考、中学园地、科学书屋、科学正听和科苑快讯等栏目。诚邀在物理学及相关领域工作的科技、教育和科普等方面的专家学者,以公众喜闻乐见的文字,深入浅出、图文并茂地与读者分享现代物理知识、科学前沿成果和大科学装置进展等精彩故事,共襄“两翼齐飞”之盛举。投稿时请将稿件的 Word 文档发送至本刊电子邮箱 mp@mail.ihep.ac.cn, 并将联系人姓名、详细地址、邮政编码,以及电话、电子信箱等联系方式附于文章末尾。

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

2024年《现代物理知识》每期定价15元,全年6期90元,欢迎新老读者订阅。

需要往期杂志的读者,请按下列价格付款:

2010~2021年单行本每期10元;2022~2023年单行本每期15元;2010~2019年合订本每本60元。

订阅方式

(1) 邮局订阅 邮发代号:2-824。

(2) 编辑部订阅(请通过银行转账到以下账号,并在附言中说明“现代物理知识**年**期”)

名称:中国科学院高能物理研究所

开户行:工商银行北京永定路支行

账号:0200004909014451557

(3) 科学出版社期刊发行部:联系电话 010-64017032 64017539;

(4) 网上购买:搜淘宝店、微店店铺名称:中科期刊;淘宝购买链接:



淘宝网购刊



微信购刊