基本物理常数和它的最小二乘法平差

罗 祎 存

（青海师范大学物理系）

本文简述了基本物理常数的重要意义，介绍基本常数最小二乘法平差的工作要点及常数推荐值的产生过程.

基本物理常数是指物理学中的一组普适常数．这些常数中有的是伴随物理规律的发现而被引入的，例如万有引力常数 G、真空中的光速 c、普朗克常数 h 等；有的是随着我们对物质结构的认识而被发现的，它表示一些物质的属性，例如电子质量 m_e，电子电量 e，阿伏伽德罗常数 N_A 等；还有一些是用这些常数组合而成的具有特殊意义的常数如里德伯常数 R_∞、精细结构常数 α 等．这些常数的基本性，在于它的普适性，其值不受时间、地点、环境等因素的影响，是反映物质结构和运动规律的自然常数．基本物理常数在物理学中占有重要的地位，特别是这些常数的发现和精确测定，对物理学的发展起了极其显著的作用．各种物理现象，以各种不同的方式联系在一起，基本物理常数起着桥梁的作用．例如，真空中光速将质量和能量联系在一起（$E=mc^2$），它是经典物理和相对论物理之间的桥梁；普朗克常数将微粒的能量（粒子性）和频率（波动性）联系在一起（$E=nh\nu$），它是量子物理和经典物理的桥梁；阿伏伽德罗常数架起了宏观物理量和微观物理量的桥梁（$R=N_Ak$）；精细结构常数把基本粒子和宏观电磁场联系在一起．从某种意义上讲，物理学每一重要的发展阶段都以有自己的特征常数为标志，例如 G，h（或 $\hbar$），c 和 α 可以说分别是牛顿力学、量子物理、相对论和量子电动力学（QED）的特征常数．这些常数的出现，加深了我们对各种物理现象本质的认识，同时也促进了物理理论和精密实验技术的进步．

一、高准确度测量基本常数

基本物理常数从发现到被测量以至达到高准确度测量，经历了相当长的时间[1]，至今仍在进行．为什么需要对基本常数进行高准确度的测量呢？大致有四个方面的原因．

1. 物理学基本理论的定量论断要求对理论方程中出现的常数数值进行准确的测定．例如，狭义相对论的基本前提是真空中光速不变，因此 c 的准确性和常数性直接影响到狭义相对论理论的成立；原子的量子理论指出，原子在二定态间的跃迁，满足 $E_m-E_n=h\nu$ 的频率条件，只有在大量光谱实验数据的基础上，当有了准确的 h 值时，才能证实这一关系的正确性，并给出准确的原子能态结构．

2. 物理的理论方程一般来讲是实际系统简化模型的抽象，作为反映方程中各物理量之间定量关系的基本常数的测量，往往必须在实际复杂系统中进行．理论模型抽象的方程是否是真实系统的理想近似，有赖于基本常数的高准确度测量．

3. 同一物理常数往往出现在物理学的各不同学科中，例如阿伏伽德罗常数出现于分子物理学、电磁学、固体物理学等学科中，这体现了物理学基本理论的共同性，因此它们的准确性就更显得重要了．

4. 基本常数准确度的提高不仅仅是增加了一位小数，而且增加的这一位小数，往往是我们

表1 e, h, m_e, N_A, α^{-1} 历次平差值及不确定度

	1953 年	1963 年	1969 年	1973 年	1986 年
$e(\times 10^{-19}C)$	1.60207(7)	1.60210(2)	1.6021917(70)	1.6021892(46)	1.60217733(49)
不确定度 (ppm)	43.7	12.5	4.4	2.9	0.30
$h(\times 10^{-34}J\cdot S)$	6.6252(5)	6.62529(16)	6.626196(50)	6.626176(36)	6.6260755(40)
不确定度 (ppm)	75.5	24.15	7.6	5.4	0.60
$m_e(\times 10^{-31}kg)$	9.1085(6)	9.10908(13)	9.109558(54)	9.109534(47)	9.1093897(54)
不确定度 (ppm)	65.9	14.3	6.0	5.1	0.59
$N_A(\times 10^{23}mol^{-1})$	6.02472(36)	6.02252(9)	6.022169(40)	6.022045([illegible])	6.0221367(36)
不确定度 (ppm)	59.8	14.9	6.6	5.1	0.59
α^{-1}	137.0377(16)	137.0388(6)	137.03602(21)	137.03604(11)	137.0359895(61)
不确定度 (ppm)	11.7	4.4	1.5	0.82	0.045

在对自然界的物理表述中发现未知矛盾和解决已知矛盾的开始. 这方面的典型事例有两个. 其一，是密立根在1907年到1917年间进行的著名油滴实验，精确测定了基本电荷 e 的数值. 他所得到的数据比稍后用其它方法确定的数据有明显的差异. 20年后，才发现这差异是由于引用了错误的实验数据，而新的测定数据可使它们在较高的准确度上相吻合. 其二是电子反常磁矩的测定. 1928年狄喇克相对论波动方程有两个重要成果: 一是导出了电子磁矩 μ_e 等于一个玻尔磁子，

$$\mu_e = \frac{e\hbar}{2m_e} = \mu_B;$$

二是极好地解释了氢原子光谱. 通过高精度的光谱测定，人们发现了由于真空涨落与极化效应产生的兰姆移位，使得量子电动力学经受了实验的检验. 而用同样的理论，如果计及高阶修正，电子磁矩对一个玻尔磁子有一很小的偏离. 1947年，P·库什和弗利实验测得

$$\mu_e = 1.001146(12)\mu_B,$$

对于这样小的偏离，没有高准确度的实验是无法实现的. 目前，μ_e 的理论值与实验值可在 10^{-9} 上相符合.

所以，高准确度测量基本常数是物理理论与实践的需要. 50年代以来，由于新技术、新方法的广泛采用，测量精度显著提高，不准确度从几十个 ppm(10^{-6}) 提高到目前的几个 ppm 以下，例如电子 g 因子的测量精度达到 0.00001 ppm. 表1给出几个主要常数从50年代后几次平差所得数据[2-6].

二、基本常数的最小二乘法平差

对于某一基本常数，我们可以用多种测量方法得到它的数值. 例如，由 $2e/h$ 测量值求 α^{-1} 值的方法可有二种:

$$\alpha^{-1} = C_1[(1/\gamma_p)(2e/h)]^{1/2} \qquad (1)$$

和

$$\alpha^{-1} = C_2\left(\frac{1}{F}\cdot\frac{1}{\mu_p/\mu_n}\cdot\frac{2e}{h}\right)^{1/2}, \qquad (2)$$

其中 C_1, C_2 是若干准确地知道的常数组合量，γ_p 是质子回旋磁比，F 是法拉第常数，μ_p/μ_n 是以核磁子为单位的质子磁矩. α^{-1} 还可以从电子的康普顿波长 λ_e 求得，

$$\alpha^{-1} = C_3(1/\lambda_e)^{1/2}. \qquad (3)$$

(1),(2),(3)式构成了对 α^{-1} 的观测方程组. 由于实验测量自身存在误差，它们给出的 α^{-1} 是不同的. 那么哪一个方程给出的 α^{-1} 是最佳的呢? 这个最佳值能否与其它方程相容?

其次，除极个别基本常数(如 G)之外，常数之间有密切的关系，这样就存在着一个自洽常数组. 例如，用密立根油滴法测出的 e 值，可求得 $N_A = F/e$，它与用X射线干涉法所得的 N_A 去求得的 e 是否能够自洽，就要考虑，从不同途径所得的常数都不是孤立的，而是与一组常数有关. 内部的自洽性体现了整体的一致性.

要解决上述两个问题，伯奇 (R. T. Birge)

于 1929 年首先提出用最小二乘法处理基本常数[7,8]. 他用此法得到的基本常数可几值，在相当长的一段时间里为物理学界所公认，直至 1952 年，因为出现了许多高精密度新实验，才被新的常数组替代[2]. 最小二乘法平差是目前处理基本常数公认的方法.

应用最小二乘法平差常数的工作主要有下列几个方面.

1. 实验数据的分类：实验所得的常数测定值作为二乘法平差的输入数据，这些输入数据分为比较精密的和不够精密的二组. 前者称为辅助常数，它的不确定度很小（Cohen 1973 年将其划在 0.5ppm 以下，1986 年达到 0.02ppm），所以可认为是精确的；后者称为随机输入数据，它们的不确定度一般可达几个 ppm. 不够精密的数据按照 Taylor 1969 年的意见，又可分为不用量子电动力学理论的（WQED）数据和 QED 数据[4]. 这样的区分原因是显然的，因为 QED 理论工作者在将理论与实验作比较时，都采用 WQED 常数. 由于理论与实验技术的提高，1986 年平差中已取消了这种区分[6]. 最小二乘法平差，就是利用辅助常数，通过观测方程组对随机输入数据进行平差. 接受平差的常数是常数中的一个子组，这个子组的标准，不仅要求不确定度要小到一定程度，而且还要考虑用它们可以表示其它全部随机输入数据，并在计算上是比较方便的. 在 1965，1969，1973 和 1986 年的几次平差中，平差常数的构成在逐渐发生变化. 它反映了测量准确度的逐步提高，同时也反映了新测量技术对常数测定的影响. 例如，交流约瑟夫森效应的 $2e/h$ 值在 1969 年是作为随机数据接受平差的，到 1973 年，它已成为辅助常数，而到 1986 年，则成为“精确”数据，提供了电压的自然基准. 量子霍耳效应的 h/e^2 值于 1986 年首次进入平差常数组，可以预见，随着测量精度的提高，很有可能在下一次平差中能改变现有的欧姆基准.

2. 实验数据评价：对所有参加平差的实验数据（包括辅助常数和随机输入数据）都要在两个方面进行评价. 一方面是实验数据与理论的一致性评价，要求实验数据和理论数据在一定标准偏差 σ 之内是符合的；另一方面是实验数据本身的一致性评价. 在平差的随机输入数据中，难免包含矛盾数据，平差工作要求一组实验数据的离散程度必须在一定限度内，这样势必要删除一些“坏数据”. 但是，由于在实际工作中往往有这样一种倾向，当发现有些实验结果与理论不符时，就要进行实验的修正或理论的修正，修正后，二者符合，但可能并没有触及原来实验中的某些误差来源，掩盖了误差的估算错误和存在的未知系统误差. 所以，必须对数据内部一致性进行评价，以确保从众多的实验数据中选取作为平差输入数据的准确性（包括其误差的准确性）. 数据评价的统计方法是伯奇比检验和 χ^2 评价.

3. 观测方程组的最小二乘法平差：作为实验所得的常数，一般总可以表示为某些常数的函数. 例如前面所给的(1)，(2)，(3)式，它们的一般形式可表示为幂乘积的形式. 又如由 α 的定义 $\alpha=(\mu_0c^2/4\pi)(e^2/\hbar c)$，对测量量 $2e/h$，可写出它的观测方程为

$$(\alpha^{-1})^{-1}e^{-1}=(\mu_0c/4)(2e/h).$$

因为在测量 $2e/h$ 中所用的单位是赫兹每 NBS 伏特（$\mathrm{Hz/V_{NBS}}$），而上式中 $2e/h$ 所要求的单位是赫兹每绝对伏特（$\mathrm{Hz/V_{ABS}}$），所以需要引入 NBS 欧姆与绝对欧姆之比 $\Omega_{\mathrm{NBS}}/\Omega_{\mathrm{ABS}}$ 和安培转换因子 $K=A_{\mathrm{NBS}}/A_{\mathrm{ABS}}$，这样上式可写为

$$(\alpha^{-1})^{-1}e^{-1}K^1N_A^0=\frac{\mu_0c}{4}\frac{\Omega_{\mathrm{ABS}}}{\Omega_{\mathrm{NBS}}}\left(\frac{2e}{h}\right)_{\mathrm{NBS}}.$$

此式左端是我们选定的一组平差常数，右端是辅助常数的组合量与某一随机输入数据($2e/h$). 对 α^{-1} 来讲，还可写出包含不同随机输入数据的其它观测方程如

$$(\alpha^{-1})^0e^1K^{-1}N_A^1=F_{\mathrm{NBS}}.$$

这样，可得到观测方程的一般形式：

$$\prod_{j=1}^{J}Z_j^{Y_{ij}}=a_iX_i,$$

其中 i 表示第 i 个观测方程（设一共有 N 个），它给出第 i 个随机输入数据 X_i 和与之相应的辅助常数组合量 a_i 的乘积. Z_j 是第 j 个平差

常数，共有 J 个. Y_{ji} 是第 i 个观测方程中第 j 个平差常数的指数(正、负整数或零). 显然，这里 $N > J$，即方程个数大于平差常数(未知量)的个数. 这样的一个方程组若是相关的，则就是一多余方程组；若是非相关的，则是一矛盾方程组. 如何在满足方程组的多组测量解中找出一组最佳解和自洽解，就是最小二乘法平差的任务. 对每个随机输入数据 X_i 来讲，相应地带入了它的实验不确定度，这个不确定度 σ_i 被定义为标准偏差，

$$\sigma_i = \left[\sum_{i=1}^{N} (X_i - \bar{X})^2/N\right]^{1/2}.$$

最小二乘法平差，就是设法从具有误差的不同的多个独立测定值中求得平差量 X 的“最佳”值. 这个最佳值应具有最小的不确定度 σ_m. 由概率极大的最可几条件，如果 N 个观测方程是彼此独立的，则平差量应是以 $1/\sigma_i^2$ 为权的加权平均值：

$$\bar{X} = \sum_{i=1}^{N} (X_i/\sigma_i^2) \Big/ \sum_{i=1}^{N} (1/\sigma_i^2),$$

而不确定度

$$\sigma_m = \left[\sum_{i=1}^{N} 1/\sigma_i\right]^{-1/2}.$$

如果观测方程是相关的，则不能简单地将各自的权 $1/\sigma_i^2$ 分配给不同方程，而需以权矩阵代替各自的权. 从这一点上看，构成 a_i 的辅助常数的不确定度必须小到使两个包含相同平差常数的观测方程成为不相关. 所以，对辅助常数的准确性要求就比较高. 而对平差的随机输入数据，也要求它的不确定度应足够小，使之在平差中具有一定的权. Taloy 推出一个经验法则：任何一个随机输入数据，如果它的误差比由直接测量或其它数据组合所得的误差大三倍，那么取入这个数据是没有意义的(其权小到 0.01)[4]. 可见，平差前的数据评价是十分重要的.

对 N 个观测方程作最小二乘法平差得到平差量 $\bar{X}$ 的同时，也得到方程中所包含的辅助常数最佳值以及它们的不确定度.

平差计算不是一次就能完成的，它是多次反复对比的结果. 对比计算，就是引入检验因子——伯奇比(和广义伯奇比)与 χ^2 因子，将它们对一平差量的加权平均值进行不确定度分配，达到数据的一致性. 伯奇 1932 年就提出，对同类数据间的不一致性，根据其内部一致性准则和外部一致性准则，权度分配有两种方法. 若由内部一致性和外部一致性所决定的误差分别为 σ_I 和 σ_E，

$$\sigma_I^2 = \sigma_m^2 = \left[\sum_{i=1}^{N} (1/\sigma_i^2)\right]^{-1},$$

$$\sigma_E^2 = \left[\sum_{i=1}^{N} (X_i - \bar{X})^2/\sigma_i^2\right] \left[(N-1)\sum_{i=1}^{N} (1/\sigma_i^2)\right]^{-1},$$

其中 σ_I 是根据预先给定的误差 σ_i 所确定的加权平均值的误差，而 σ_E 是由每个 X_i 与给定误差 σ_i 相比较，测量值对平均值偏差多少而决定的预期误差，则可引入 χ^2 因子和定义伯奇比 R_B：

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N} (X_i - \bar{X})^2/\sigma_i^2,$$

$$\sigma_E^2 = \chi^2 (N-1)^{-1} \sigma_I^2,$$

$$R_B = \sigma_E/\sigma_I = [\chi^2/(N-1)]^{1/2}.$$

如果预先给定的误差是实验不确定度的真实表示，则有 $\sigma_E = \sigma_I$，即 R_B 的期望值为 1. 若 R_B 比 1 大得多，则数据的可靠性值得怀疑，σ_i 的预先给定量偏低；反之 R_B 比 1 小得多，数据的一致性较好，σ_i 的估计可能偏大. 令 $\nu = N-1$，为平差自由度，对不同的自由度，可得相应的 χ^2 的概率.

在更一般的情况下，我们要将因次观测方程线性化. 如果方程变量 Z_i 在可信值 Z_{i_0} 附近是线性，则可得新的线性观测方程组：

$$\sum_{j=1}^{J} Y'_{ji} Z_j = B_i,$$

由最小二乘法引入标准化残差 γ_i，

$$\gamma_i = (1/\sigma_i)\left[\sum_{j=1}^{J} Y'_{ji} Z_j - B_i\right],$$

那么 χ^2 因子为

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N} \left[\left(\prod_{j=1}^{J} Z_j^{Y_{ji}} - a_i X_i\right)^2/\sigma_i^2\right],$$

它的线性变式为

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{N} \gamma_i^2.$$

χ^2 是标准化残差的平方和，则广义伯奇比

$$R_B = [\chi^2/(N-J)]^{1/2}.$$

自由度 $\nu = N - J$，R_B 的期望值为 1，亦即 χ^2 的概率期望值为 $N - J$. 伯奇比的引入，使得能用统计概率方法，在反复多次的平差中协调数据的一致性，舍弃某些观测方程或某些项次的数据，最终调节平差结果的不确定度，使所有输出数据相互一致.

常数平差算法和它的评价检验方法，目前仍在发展和完善之中[9]. 表 2 给出最近四次平差的伯奇比和 χ^2 因子值[3-6].

表 2 四次平差 γ, χ^2 和 R_B 值

	1963 年	1969 年	1973 年	1986 年
$\nu = N - J$	3=9−6	8=14−6	21=27−6	17=22−5
χ^2	0.34	1.360	14.50	17.01
R_B	0.33	0.412	0.83	1

4. 输出数据：对最后确定的观测方程组作最小二乘法平差后，可得到具有最小标准化残差的平差常数和方程中所包含的一组自洽的辅助常数，并同时给出平差常数和辅助常数的不确定度. 按照 CODATA 的惯例，输出数据以 ××. ××××(××)的形式给出. 括号内的数据表示所给数据最后两位的一个标准差，它由内部一致性算出，即 σ_1. 基本物理常数国际推荐值包括五个项目：物理量名称、符号、值、单位(包括因子)和不确定度（相对不确定度）. 不确定度以 ppm 为单位，等于 σ_1 与值的比值. 除辅助常数的不确定度取为精确值外，其余常数的不确定度都是相关的. 在取两个以上常数计算时，其误差应按误差传播定律确定，即不仅要考虑它们的方差和标准差，还要考虑相互间的协方差.

常数的平差工作自 1929 年以来已有 60 年的历史，先后经历了 7—8 次重要的平差，特别是国际科学技术数据委员会 (CODATA) 自 1966 年成立以来，统一协调了基本常数工作. 得到了较高的评价. 但是，常数的平差工作中仍存在一些困难和问题，象引力常数 G、气体常数 R 和辐射的斯忒藩-玻耳兹曼常数 σ 等重要常数还不能参加平差，它们的不确定度都较大；数据的评价和平差算法还在进一步完善之中.

[1] E. R. Cohen et al., Fundamental Constants of Physics, *Interscience Publishers, Inc.*, New York, (1957).
[2] M. DuMond and E. R. Cohen, *Rev. Mod. Phys.*, **25** (1953), 691.
[3] E. R. Cohen and M. DuMond, *Rev. Mod. Phys.*, **37** (1965), 537.
[4] B. N. Taylor et al., *Rev. Mod. Phys.*, **41**(1969), 375.
[5] E. R. Cohen and B. N. Taylor, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **2**(1973), 663.
[6] E. R. Cohen and B. N. Taylor, *Rev. Mod. Phys.*, **59** (1987), 1121.
[7] R. T. Birge, *Rev. Mod. Phys.*, **1**(1929), 1.
[8] R. T. Birge, *Phys. Rev.*, **40**(1932), 207.
[9] 沈乃澂，物理，**16**(1987)，7.

(上接第250页)

不久人们就用从一般理论所导出的夸克来表示部分子. 粒子物理学的重要任务之一就是测定夸克在质子和中子中的分布. 费因曼企图去理解量子色动力学(部分子相互作用理论)的方式是独特的，特别是对夸克约束在强子中的处理. 但是，由于他长期患胃癌，这项工作就中断了.

费因曼热爱生活的一切，他生活在物理学中. 他总是要把他的热情传给其他人——他的同事和他的学生.

费因曼的倾向总是直接面向生活和科学. 他不喜欢浮夸的人，而且戏弄他们，但是通常是温和的，并不伤害他们. 费因曼在"挑战者"航天飞机灾难的调查中，把问题的关键用一杯冰水中的橡皮O圈简单地演示出来，他的那种迅速抓住问题实质的神奇能力已众所周知了.

费因曼在物理学研究中总是和实验保持密切的关系，而对深奥的理论不感兴趣. 费因曼的三卷本《物理学教程》把新概念和物理学基础结合起来，就是很好的例证. 他比其他的科学家更为他的同事和学生所爱戴.

（郭跃进译自 Nature 1988 年第 6165 期第 588 页）