计算物理学作业 2

1. 完成所有题目。作业截止日期面议。
2. 请提交一个 PDF 格式的作业解答，其中可以描述相应的解题步骤，必要的图表等 (建议用 LaTeX 进行排版)
3. 请提交程序的源文件 (格式：python/fortran/c,c++)，并请提交一个源文件的说明文档 (任意可读格式)，主要说明源程序如何编译、输入输出格式等方面的事宜。请保证它们能够顺利编译通过，同时运行后产生你的解答中的结果。
4. 所有文件打包后发送到课程的公邮。压缩包的文件名和邮件题目请取为“学号 + 姓名 + 作业 1”(如果多于一个人，请写“所有学号 + 所有姓名 + 作业 1”)。

1. *Runge 效应* 考虑 Runge 函数 $f(x) = 1/(1+25x^2)$ 在区间 $[-1,+1]$ 上的行为。本题中将分别利用等间距的多项式内插、Chebyshev 内插以及三次样条函数来近似 $f(x)$ 的数值 (请提供三种内插相应的程序代码)。

   (a) 考虑 $x \in [-1,+1]$ 之间 21 个均匀分布的节点 (包括端点，相隔 0.1 一个点) 的 20 阶多项式 $P_{20}(x)$ 之内插 (你可以利用各种方法，例如拉格朗日内插、牛顿内插或者 Neville 方法)。给出一个表分别列出 x，$f(x)$，$P_{20}(x)$ 以及两者差的绝对值。为了看出两者的区别请在这 21 个点分成的每个小段的中点也取一个数据点并一起列出 (因此共有 41 个点)，同时画图显示之。

   (b) 现在选取 $n = 20$ 并将上问中均匀分布的节点换为标准的 Chebyshev 节点：

$$x_k = \cos\left(\frac{\pi(k+1/2)}{20}\right)\ , k = 0, 1, \cdots, 19\ . \tag{1}$$

   然后构造 $f(x)$ 在 $[-1,+1]$ 上的近似式，

$$f(x) \approx C(x) \equiv -\frac{c_0}{2} + \sum_{k=1}^{20} c_k T_k(x)\ . \tag{2}$$

   其中在各个 Chebyshev 的节点处我们要求它严格等于 $f(x)$。同样列出上问的表并画图，与上问结果比较。

   (c) 仍然考虑第一问中均匀分布的 21 个节点的内插。但这次利用 21 点的三次样条函数。重复上面的列表、画图并比较。

2. *样条函数在计算机绘图中的运用* 本题中我们考虑 Cubic spline 在计算机绘图中的广泛运用。我们将尝试用三次样条函数平滑地连接若干个二维空间中已知的点。考虑二维空间的一系列点 (x_i, y_i)，$i = 0, 1, \cdots, n$。我们现在希望按照顺序 (由 0 到 n) 将

它们平滑地连接起来。一个方便的办法是引入一个连续参数 $t \in [0, n]$，取节点为 $t_i = 0, 1, \cdots, n$ 然后分别建立两个样条函数：$S_\Delta(X; t)$ 和 $S_\Delta(Y; t)$ 它们分别满足

$$S_\Delta(X; t_i) = x_i \ , \quad S_\Delta(Y; t_i) = y_i \ . \tag{3}$$

这两个样条函数可以看做是 $(x(t), y(t)$ 的内插近似。因此绘制参数曲线 $(x(t), y(t))$ 的问题就化为求出两个样条函数并将它们画出的问题。我们考虑的函数是著名的心形线 (cardioid)。它的极坐标方程是

$$r(\phi) = 2a(1 - \cos\phi) = 1(1 - \cos\phi) \ . \tag{4}$$

为了方便起见我们取了 $2a = 1$。(请利用上一题中关于样条函数内插的相应代码来处理本题)

(a) 选取 $\phi = t\pi/4$，$t = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8$ 这九个点，给出 $x_t = r(\phi)\cos\phi$ 和 $y_t = r(\phi)\sin\phi$ 的数值。将这些数值作为精确的数值列在一个表里。

(b) 给出过这 8 个点的两个三次样条函数 $S_\Delta(X; t)$ 和 $S_\Delta(Y; t)$

(c) 画出参数形式的曲线 $(x_t, y_t) = (S_\Delta(X; t), S_\Delta(Y; t))$，同时画出它所内插的严格的曲线进行比较，请标出相应的节点。

(d) 简要说明为什么这个算法可以平滑地连接所有的点 (这实际上是很多画图程序中 spline 曲线所采用的算法)。

3. **含有 zeta 函数的方程求解** 在格点量子色动力学的研究中会遇到一种称为 zeta 函数的特殊函数，它的形式定义为：

$$\mathcal{Z}_{lm}(s; q^2) = \sum_{\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3} \frac{\mathcal{Y}_{lm}(\mathbf{n})}{(\mathbf{n}^2 - q^2)^s} \ , \tag{5}$$

其中 s 为一个复的参数，$\mathbf{n} \in \mathbb{Z}^3$ 为三维整数，$\mathcal{Y}_{lm}(\mathbf{r}) = r^l Y_{lm}(\Omega_{\mathbf{r}})$ 是关于 $\mathbf{r} = (x, y, z)$ 的 l 次齐次函数 (其中 Y_{lm} 是标准的球谐函数)。我们经常用到的情形是 $s = 1$ 并且 $l = m = 0$ 的情形。这时 $\mathcal{Y}_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$。注意这个表达式在 $s = 1$ 的时候是发散的，因此必须进行解析延拓。最后经过一系列的变形，适合进行数值计算的表达式为：[1]

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_{lm}(1; q^2) &= \sum_{\mathbf{n}} \frac{\mathcal{Y}_{lm}(\mathbf{n}) e^{q^2 - \mathbf{n}^2}}{\mathbf{n}^2 - q^2} - \pi\delta_{l0}\delta_{m0} + \frac{\pi}{2}\delta_{l0}\delta_{m0} \int_0^1 dt t^{-3/2} (e^{tq^2} - 1) \\ &+ \pi \int_0^1 dt t^{-3/2} \sum_{\mathbf{n} \neq 0} \mathcal{Y}_{lm}\left(-i\frac{\pi}{t}\mathbf{n}\right) e^{tq^2} e^{-(\pi^2/t)\mathbf{n}^2} \end{aligned} \tag{6}$$

大家可以验明上式中的各个积分都是收敛的。请注意，虽然上述表达式中貌似包含无穷的求和，但是考虑到数值上 $e^{-\mathbf{n}^2}$ 和 $e^{-(\pi^2/t)\mathbf{n}^2}$ 的因子衰减的非常快，因此实际上无穷求和中只需要真正计算有限多项即可。

[1] 参见 X. Feng, X. Li and C. Liu, Phys. Rev. D70, 014505 (2004) 的 Appendix A 中的 (A7) 式.

(a) 请分析一下，对于参量 $q^2 \in (0,3)$，如果要求 zeta 函数 $\mathcal{Z}_{00}(1;q^2)$ 的精度达到六位或 12 位有效数字，那么计算公式 (6) 中的无穷求和分别至少应保留多少项？(最小可以从 $q^2 = 0.001$ 开始，并给出更小的 q^2 的渐进行为即可)

(b) 在数值模拟研究中，上述 zeta 函数与两个粒子的散射相移 $\delta_l(q^2)$ (其中的 q^2 与两个粒子相对的动量平方 k^2 成正比) 联系在一起：

$$\pi^{3/2} q \cot\delta_0(q^2) = \mathcal{Z}_{00}(1;q^2)\ . \tag{7}$$

在低能散射过程中，$q^2 \lesssim 1$，这时散射相移可以展开为：

$$q\cot\delta_0(q^2) = \frac{1}{A_0} + \frac{R_0}{2}q^2 + \cdots\ , \tag{8}$$

其中的 A_0 称为 (无量纲的) 散射长度而 R_0 则称为 (无量纲的) 有效力程。如果对某个低能散射过程 (即 $q^2 \lesssim 1$) 而言，$A_0 = 1.0$，$R_0 = 0.5$，结合上述两式解出一个合理的 q^2 值来 (请给出六位有效数字)。