

## 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：

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

然后构造  $f(x)$  在  $[-1, +1]$  上的近似式，

$$f(x) \approx C(x) \equiv -\frac{c_0}{2} + \sum_{k=0}^{20} c_k T_k(x). \quad (2)$$

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  $(x_i, y_i)$ ,  $i = 0, 1, \dots, n$ 。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  $t_i = 0, 1, \dots, n$  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

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

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

$$r(\phi) = 2a(1 - \cos \phi) = 1(1 - \cos \phi). \quad (4)$$

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软件中 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:

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

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:<sup>1</sup>

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

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。

<sup>1</sup> 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  $Z_{00}(1; q^2)$  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:

$$\pi^{3/2} q \cot \delta_0(q^2) = Z_{00}(1; q^2). \quad (7)$$

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

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

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)。