

# 计算物理 2018 秋季第二次作业

\*

2019 年 1 月 29 日

## 1 Runge 效应

### 1.1 问题 (a) 多项式内插 $P_{20}(x)$

这里使用牛顿内插法。得到  $x, f(x), P_{20}(x)$  见下表 3。可以看出在  $x=\pm 1$  附近 Runge 效应比较严重，多项式的波动很大。

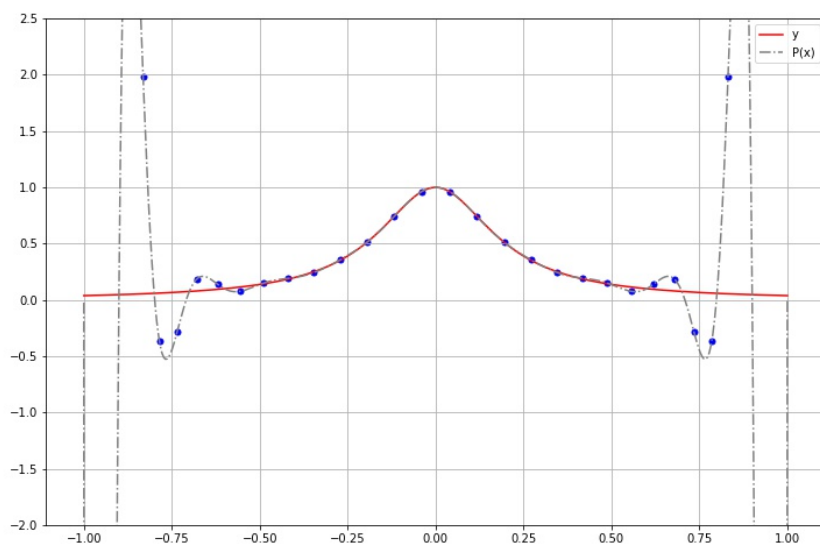


图 1: 使用牛顿内插法得到的 Runge 效应

### 1.2 问题 (b) 切比雪夫内插

计算得到的  $x, f(x), T_{20}(x)$  见下表 2。可以与多项式内插作对比发现，切比雪夫内插得到的结果稳定得多，没有强烈的震荡，但是在  $x=0$  附近有较大偏差。注意到  $x=0$  并不是切比雪夫多项式拟合取到的点，可能因此不能保证在零点附近的准确性。

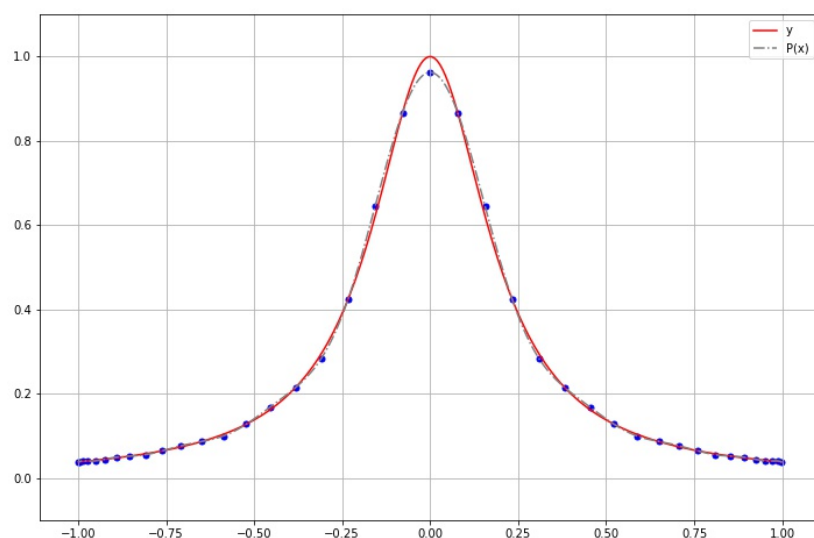


图 2: 使用切比雪夫内插得到的函数

### 1.3 问题 (c) 三次样条函数

使用三次样条, 这里采用的边界条件是在端点处一阶导数与原函数相等。得到的结果见表 3。可以由图观察得三次样条插值结果比前两种都要准确。

## 2 样条函数在计算机绘图中的运用

### 2.1 问题 (a)

得到的结果如下表 4

### 2.2 问题 (b)

使用三次样条插值, 在边界条件的选择上应当根据实际情况决定。在这个题目中  $t = 0$  和  $t = 8$  时实际上是同一个点, 所以应当使用周期性边界条件。如果使用周期性边界条件则需要解一个系数矩阵为非三对角的线性方程组。

为了简化运算, 再挖掘此问题的特点, 可以发现

$$x'(t) = \frac{d\phi}{dx} \frac{dx}{d\phi} = \frac{\pi}{4} (\sin\phi \cos\phi - \sin\phi + \sin\phi \cos\phi) \quad (1)$$

故  $x'(0) = 0 - 0 + 0 = 0$ 。同理有

$$y'(t) = \frac{d\phi}{dy} \frac{dy}{d\phi} = \frac{\pi}{4} (\sin\phi \sin\phi - \cos\phi + \cos\phi \cos\phi) \quad (2)$$

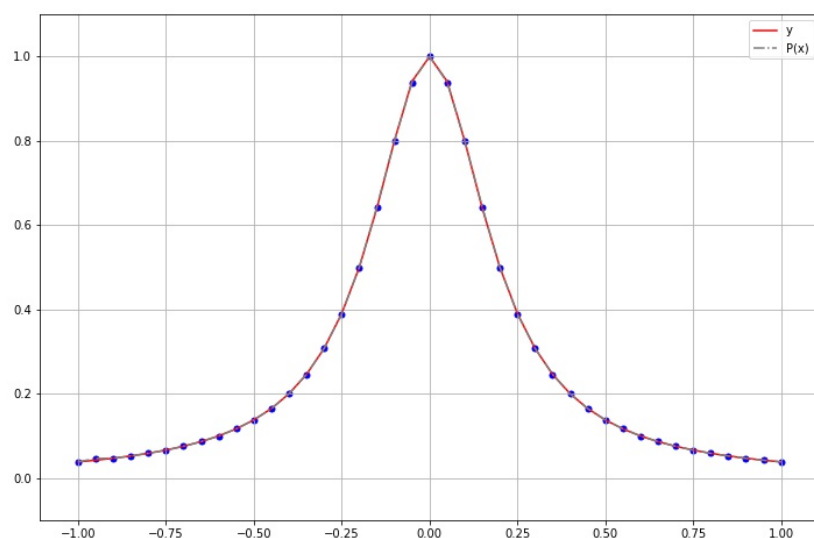


图 3: 使用三次样条插值得到的函数

故  $y'(0) = 0 - 1 + 1 = 0$ 。于是可以选择第三类边界条件，令一阶导数为 0，这样就能满足函数在  $t = 0$  处连续且一阶导连续，即

$$S'_{\Delta}(X; t_0) = 0 \quad S'_{\Delta}(X; t_n) = 0 \quad (3)$$

$$S'_{\Delta}(Y; t_0) = 0 \quad S'_{\Delta}(Y; t_n) = 0 \quad (4)$$

下面给出各个节点处的矩，见表 5，可以唯一确定这个函数。

### 2.3 问题 (c)

图形见图 4。可以观察到灰色虚线为样条插值的结果，是光滑的。

### 2.4 问题 (d)

因为在计算三次样条函数时，保证了在每个采样点都保证了有  $S_{\Delta}(f; x)$  的一阶、二阶导数连续，而且在两个端点采用的边界条件是二阶导数为 0，所以在绘图的时候参数曲线的曲率是连续变化的，不会发生突变，所以可以平滑地连接所有的点。

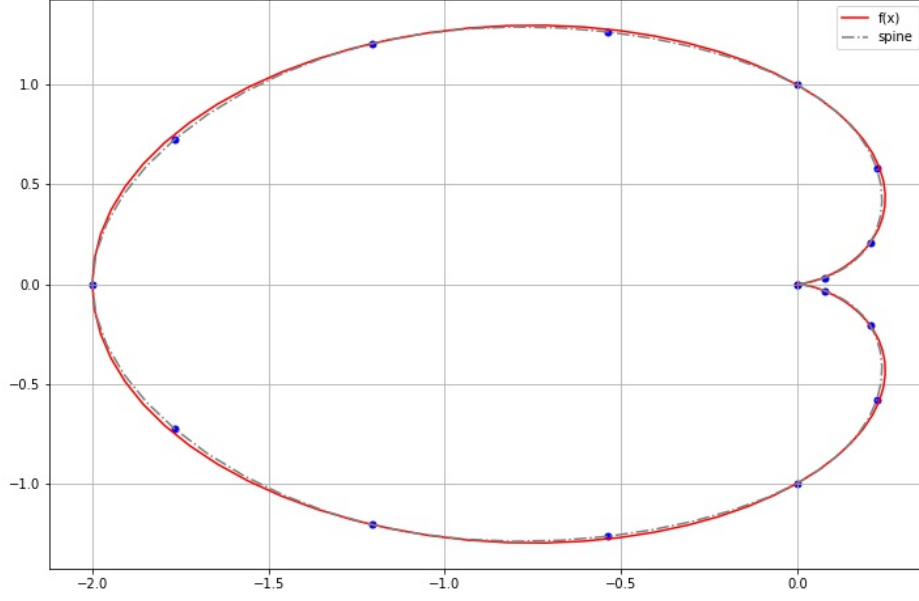


图 4: 心形线

### 3 含有 zeta 函数的方程求解

在本题主要只考虑  $l = m = 0$  的情况下, 那么 zeta 函数可以为

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_{00}(1; q^2) &= \frac{e^{q^2}}{\sqrt{4\pi}} \sum_n \frac{e^{-n^2}}{n^2 - q^2} - \pi + \frac{\pi}{2} \int_0^1 dt t^{-3/2} (e^{tq^2} - 1) \\ &\quad + \frac{\sqrt{\pi}}{2} \int_0^1 dt t^{-3/2} e^{tq^2} \sum_{n \neq 0} e^{-(\pi^2/t)n^2} \end{aligned} \quad (5)$$

#### 3.1 问题 (a)

逐项考虑。第一项是求和, 下面试图将求和转换为积分。借鉴统计力学处理态密度的方法, 设  $D(x)$  为满足  $|n^2| = x$  的  $n$  个数。

$$T_1 = \frac{e^{q^2}}{\sqrt{4\pi}} \sum_{n^2 \geq n_0^2} \frac{e^{-n^2}}{n^2 - q^2} = \frac{e^{q^2}}{\sqrt{4\pi}} \sum_{x \geq n_0^2} \frac{e^{-x}}{x - q^2} \cdot D(x) \quad (6)$$

当  $x$  足够大的时候  $\sum_{r^2 \leq x < (r+1)^2} D(x)$  约等于  $4\pi r^2$ , 另外考虑到只在  $q^2 \in (0, 3)$  上考

虑, 设  $R = T_1(\frac{e^{q^2}}{\sqrt{4\pi}})^{-1}$ , 于是有

$$\begin{aligned}
R &\leq \sum_{r \geq n_0} \frac{e^{-r^2}}{r^2 - q^2} \left( \sum_{r^2 \leq x < (r+1)^2} D(x) \right) \\
&\approx \int_{n_0}^{\infty} 4\pi r^2 \frac{e^{-r^2}}{r^2 - q^2} dr \\
&= \int_{n_0}^{\infty} \left( 1 + \frac{q^2}{r^2 - q^2} \right) 4\pi e^{-r^2} dr \\
&\leq \left( 1 + \frac{3}{n_0^2 - 3} \right) 2\pi^{3/2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{n_0}^{\infty} e^{-r^2} dr \\
&= \left( 1 + \frac{3}{n_0^2 - 3} \right) \cdot 2\pi^{3/2} (1 - \text{erf}(n_0))
\end{aligned} \tag{7}$$

要达到 6 位有效数字, 查表可以知道  $\text{erfc}(4) = 1.54 \times 10^{-8}$ , 这样的话带入计算上面式子可以得到  $R \leq 2.1132 \times 10^{-7}$ , 这样要达到 6 位小数的精度是可以的; 要达到 12 为有效数字, 可以查表得到  $\text{erfc}(6) = 2.15 \times 10^{-17}$ , 这样的话带入计算上面式子可以得到  $R \leq 2.6144 \times 10^{-16}$ 。

第二项  $T_2$  是常数  $\pi$ 。

**第三项是一个积分**, 不涉及求和, 但是在具体数值求解的时候依然需要讨论达到要求精度所需要的求和项数, 这里加以讨论。留意到在  $t = 0$  附近可以将指数展开, 由于积分收敛, 而且被积函数为正, 所以该积分绝对收敛, 积分和无穷求和可以交换顺序, 那么利用  $e^{tq^2} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(tq^2)^m}{m!}$ , 带入原来的式子可以得到

$$\begin{aligned}
T_3 &= \frac{\pi}{2} \int_0^1 dt t^{-3/2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(tq^2)^m}{m!} \\
&= \frac{\pi}{2} \sum_{m=0}^{\infty} \int_0^1 dt t^{-3/2} \frac{(tq^2)^m}{m!} \\
&= \frac{\pi}{2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{q^{2m}}{m!(m - \frac{1}{2})}
\end{aligned} \tag{8}$$

要保证精度, 那么要求这个求和的余项要足够小, 下面讨论其余项  $R_2$ 。设其在  $m = n$  的时候截断, 那么可以通过放缩, 再用拉格朗日余项表示得到,

$$\begin{aligned}
R_2 &= \frac{\pi}{2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{q^{2m}}{m!(m - \frac{1}{2})} \\
&= \frac{\pi}{2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{q^{2m}}{m!} \\
&< \frac{\pi}{2} e^{q^2} \frac{(q^2)^{m_0+1}}{(m_0 + 1)!} \\
&< \frac{\pi}{2} e^3 \frac{(3)^{m_0+1}}{(m_0 + 1)!}
\end{aligned} \tag{9}$$

要让其达到 6 位小数的精度，需要取  $n=18$ ，这时候得到的结果  $R_2 \approx 3.014 \times 10^{-7}$ ；要达到 12 位小数的精度，则需要取  $n=25$ ，这时候得到的结果为  $R_2 \approx 1.989 \times 10^{-13}$ 。故求和只需要分别求到  $n=17$  和  $n=24$ 。

**第四项是积分**，因为积分收敛而且被积函数是正的，所以积分绝对收敛，可以交换积分号和求和号。接下来讨论其余项  $R_3$ ，

$$R_3 \leq \frac{\sqrt{\pi}}{2} e^{q^2} \sum_{|n| > n_0} \int_0^1 dt t^{-3/2} e^{-(\pi^2/t)n^2} = \sqrt{\pi} e^{q^2} \sum_{|n| \geq n_0} \int_1^\infty e^{-\pi^2 n^2 x^2} dx \quad (10)$$

这里使用了  $x = \frac{1}{\sqrt{t}}$  的代换。然后对积分下限进行放缩，得到

$$R_3 \leq \frac{e^{q^2}}{\pi^{3/2}} \sum_{|n| \geq n_0} \frac{e^{-\pi^2 n^2}}{n^2} \quad (11)$$

使用与处理  $R_1$  一样的办法，观察  $e$  的指数可以知道这里要让  $r = |n|\pi$ ，可以得到

$$R_3 \leq 2\pi e^{q^2} \text{erfc}(\pi n_0) \leq 126.201 * \text{erfc}(\pi n_0) \quad (12)$$

查表得到  $n_0$  取 2 的时候  $R_3 \approx 8.0115 \times 10^{-17}$ ，已经能达到要求。

**另外，有效数字和精确的小数位是不一样的。**简单地说，如果原式的绝对值大于 1，那么精确到 6 位小数，就一定能够达到 6 位有效数字，然而如果原式的绝对值很小，那么精确 6 位小数不一定能得到 6 位有效数字。根据上面讨论的结果，我们分别讨论各项。

对于第一项，取  $n^2 = 0, 1, 2, 3$  来讨论，注意需要假设  $q$  不是整数，这样级数不会发散。(D(x) 的值可以通过简单的枚举得到)

$$S = \frac{e^{q^2}}{\sqrt{4\pi}} \left( \frac{e^{-0}}{0 - q^2} + 3 \frac{e^{-1}}{1 - q^2} + 3 \frac{e^{-3}}{3 - q^2} + \frac{e^{-4}}{4 - q^2} \right) \quad (13)$$

当  $q^2$  趋近于 0, 1, 2 的时候都会使得求和趋近负无穷，加上后面的求和项，那么  $Z_{00}$  会趋于 0。简单起见，这里忽略第一项的影响，假设其绝对值不与其他项的绝对值接近，这样的话  $Z_{00}$  不会离 0 太近。

对于第二和第三项，考虑求和的第一项为  $-\pi + \pi q^2$ ， $|\pi - \pi q^2| > 1$  解得大约为  $q^2 < 0.68$  或  $1.31 < q^2$ 。而当  $0.68 < q^2 < 1.31$ ， $R_1$  的绝对值是大于 1 的。

对于第四项，求和项是指数下降的，而且求和不包括  $n=0$ ，所以可以判断其是小项，不会使得式子绝对值大于 1。

综上， $q^2 \in (0, 3)$  的时候大多数的  $q$  值都会时原式大于 1，上述讨论中满足精确小数位数就一定能够满足有效位数的要求。在部分  $q$  值下原式绝对值趋于 0，需要进一步讨论。

**结论：**所以要得到 6 位有效数字，第一项、第三项、第四项求和要分别保留到第 3 项、第 17 项、第 1 项；要得到 12 位有效数字，第一项、第三项、第四项求和要分别保留到第 5 项、第 24 项、第 1 项（每项的具体定义见上述讨论）。

### 3.1.1 问题 (b)

根据题目假设, 我们可以令  $h(q^2) = \mathcal{Z}_{00}(1; q^2) - \pi^{3/2}(\frac{1}{A_0} + \frac{R_0}{2}q^2) = \mathcal{Z}_{00}(1; q^2) - \pi^{3/2}(1.0 + \frac{1}{4}q^2)$ , 求解方程  $h(q^2) = 0$  在  $(0,1)$  上的零点。使用二分法的办法求解。

根据问题 (a) 的讨论, 下面分析求解 zeta 函数值

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_{00}(1; q^2) &= \frac{e^{q^2}}{\sqrt{4\pi}} \sum_n \frac{e^{-n^2}}{n^2 - q^2} - \pi + \frac{\pi}{2} \int_0^1 dt t^{-3/2} (e^{tq^2} - 1) \\ &\quad + \frac{\sqrt{\pi}}{2} \int_0^1 dt t^{-3/2} e^{tq^2} \sum_{n \neq 0} e^{-(\pi^2/t)n^2} \end{aligned} \quad (14)$$

第一项求解到  $|n|=4$ , 第二项是常数, 第三项用泰勒展开保留到第 17 项, 第四项保留到  $|n|<2$ 。下面讨论第四项求法的细节:

$$\frac{\sqrt{\pi}}{2} \int_0^1 dt \cdot t^{-3/2} e^{tq^2} (6e^{-\pi^2/t} + 12e^{-2\pi^2/t} + 8e^{-3\pi^2/t}) \quad (15)$$

由于存在  $t^{-3/2}$  和  $e^{-\pi/t}$ , 在  $t$  趋于 0 的时候求值会有比较大的误差, 所以我们需要对下限做一些调整, 不用积分到很小的值, 只需要从  $\epsilon$  开始积分, 而且选择  $\epsilon$  时保证  $(0, \epsilon)$  上的积分值会小于  $10^{-7}$  就可以保证在精确到 6 位小数的情况下, 不对结果产生影响。我们考察误差  $\Delta$ ,

$$\begin{aligned} \Delta &\leq \frac{\sqrt{\pi}}{2} \int_0^\epsilon dt \cdot t^{-3/2} e^{tq^2} e^{-\pi^2/t} (6 + 12 + 8) \\ &\leq 26\sqrt{\pi} e^{\epsilon q^2} \int_{1/\sqrt{\epsilon}}^\infty e^{-\pi^2 x} dx \\ &\leq \frac{26e^\epsilon}{\pi^{3/2}} e^{-\pi^2/\sqrt{\epsilon}} \end{aligned} \quad (16)$$

那么如果取  $\epsilon = 0.25$ ,  $\Delta < 1.60 \times 10^{-8}$ , 符合要求, 那么可以把积分改成  $[0.25, 1]$ , 并采用 Simpson 法则, 进行积分。

最终求得  $q^2 = 0.794516$ 。具体求解的代码请查附件。

## 4 附表

| $x_i$ | $f(x_i)$ | $P_n(x_i)$ | $\Delta(x_i)$ | $x_i$ | $f(x_i)$ | $P_n(x_i)$ | $\Delta(x_i)$ |
|-------|----------|------------|---------------|-------|----------|------------|---------------|
| -1    | 0.038462 | 0.038462   | 0             | 0.05  | 0.941176 | 0.94249    | 0.001314      |
| -0.95 | 0.04244  | -39.9524   | 39.9949       | 0.1   | 0.8      | 0.8        | 0             |
| -0.9  | 0.047059 | 0.047059   | 0             | 0.15  | 0.64     | 0.636755   | 0.003245      |
| -0.85 | 0.052459 | 3.45496    | 3.4025        | 0.2   | 0.5      | 0.5        | 0             |
| -0.8  | 0.058824 | 0.058824   | 0             | 0.25  | 0.390244 | 0.395093   | 0.004849      |
| -0.75 | 0.06639  | -0.447052  | 0.513442      | 0.3   | 0.307692 | 0.307692   | 0             |
| -0.7  | 0.075472 | 0.075472   | 0             | 0.35  | 0.246154 | 0.238446   | 0.007708      |
| -0.65 | 0.086486 | 0.202423   | 0.115936      | 0.4   | 0.2      | 0.2        | 0             |
| -0.6  | 0.1      | 0.1        | 0             | 0.45  | 0.164948 | 0.179763   | 0.014814      |
| -0.55 | 0.116788 | 0.08066    | 0.036128      | 0.5   | 0.137931 | 0.137931   | 0             |
| -0.5  | 0.137931 | 0.137931   | 0             | 0.55  | 0.116788 | 0.08066    | 0.036128      |
| -0.45 | 0.164948 | 0.179763   | 0.014814      | 0.6   | 0.1      | 0.1        | 0             |
| -0.4  | 0.2      | 0.2        | 0             | 0.65  | 0.086486 | 0.202423   | 0.115936      |
| -0.35 | 0.246154 | 0.238446   | 0.007708      | 0.7   | 0.075472 | 0.075472   | 0             |
| -0.3  | 0.307692 | 0.307692   | 0             | 0.75  | 0.06639  | -0.447052  | 0.513442      |
| -0.25 | 0.390244 | 0.395093   | 0.004849      | 0.8   | 0.058824 | 0.058824   | 0             |
| -0.2  | 0.5      | 0.5        | 0             | 0.85  | 0.052459 | 3.45496    | 3.4025        |
| -0.15 | 0.64     | 0.636755   | 0.003245      | 0.9   | 0.047059 | 0.047059   | 0             |
| -0.1  | 0.8      | 0.8        | 0             | 0.95  | 0.04244  | -39.9524   | 39.9949       |
| -0.05 | 0.941176 | 0.94249    | 0.001314      | 1     | 0.038462 | 0.038462   | 0             |
| 0     | 1        | 1          | 0             |       |          |            |               |

表 1: 牛顿内插法



| $x_i$     | $f(x_i)$ | $T_n(x_i)$ | $\Delta(x_i)$ | $x_i$     | $f(x_i)$ | $T_n(x_i)$ | $\Delta(x_i)$ |
|-----------|----------|------------|---------------|-----------|----------|------------|---------------|
| 0.996917  | 0.038691 | 0.038691   | 0             | -0.078459 | 0.866629 | 0.866629   | 0             |
| 0.987688  | 0.039388 | 0.040869   | 0.001481      | -0.156434 | 0.620427 | 0.643749   | 0.023322      |
| 0.97237   | 0.040588 | 0.040588   | 0             | -0.233445 | 0.423295 | 0.423295   | 0             |
| 0.951057  | 0.04235  | 0.040758   | 0.001592      | -0.309017 | 0.295221 | 0.284124   | 0.011097      |
| 0.92388   | 0.044765 | 0.044765   | 0             | -0.382683 | 0.214539 | 0.214539   | 0             |
| 0.891007  | 0.047968 | 0.049771   | 0.001803      | -0.45399  | 0.162531 | 0.16864    | 0.00611       |
| 0.85264   | 0.052152 | 0.052152   | 0             | -0.522499 | 0.127794 | 0.127794   | 0             |
| 0.809017  | 0.057595 | 0.05543    | 0.002165      | -0.587785 | 0.103764 | 0.099863   | 0.003901      |
| 0.760406  | 0.064702 | 0.064702   | 0             | -0.649448 | 0.086621 | 0.086621   | 0             |
| 0.707107  | 0.074074 | 0.076859   | 0.002784      | -0.707107 | 0.074074 | 0.076859   | 0.002784      |
| 0.649448  | 0.086621 | 0.086621   | 0             | -0.760406 | 0.064702 | 0.064702   | 0             |
| 0.587785  | 0.103764 | 0.099863   | 0.003901      | -0.809017 | 0.057595 | 0.05543    | 0.002165      |
| 0.522499  | 0.127794 | 0.127794   | 0             | -0.85264  | 0.052152 | 0.052152   | 0             |
| 0.45399   | 0.162531 | 0.16864    | 0.00611       | -0.891007 | 0.047968 | 0.049771   | 0.001803      |
| 0.382683  | 0.214539 | 0.214539   | 0             | -0.92388  | 0.044765 | 0.044765   | 0             |
| 0.309017  | 0.295221 | 0.284124   | 0.011097      | -0.951057 | 0.04235  | 0.040758   | 0.001592      |
| 0.233445  | 0.423295 | 0.423295   | 0             | -0.97237  | 0.040588 | 0.040588   | 0             |
| 0.156434  | 0.620427 | 0.643749   | 0.023322      | -0.987688 | 0.039388 | 0.040869   | 0.001481      |
| 0.078459  | 0.866629 | 0.866629   | 0             | -0.996917 | 0.038691 | 0.038691   | 0             |
| 0         | 1        | 0.96241    | 0.03759       | -1        | 0.038462 | 0.037016   | 0.001446      |
| -0.078459 | 0.866629 | 0.866629   | 0             |           |          |            |               |

表 2: 切比雪夫内插法

| $x_i$ | $f(x_i)$ | $SP_n(x_i)$ | $\Delta(x_i)$ | $x_i$ | $f(x_i)$ | $SP_n(x_i)$ | $\Delta(x_i)$ |
|-------|----------|-------------|---------------|-------|----------|-------------|---------------|
| -1    | 0.038462 | 0.038462    | 0             | 0.05  | 0.941176 | 0.938866    | 0.00231       |
| -0.95 | 0.04244  | 0.046455    | 0.004014      | 0.1   | 0.8      | 0.8         | 0             |
| -0.9  | 0.047059 | 0.047059    | 0             | 0.15  | 0.64     | 0.643169    | 0.003169      |
| -0.85 | 0.052459 | 0.052457    | 2e-06         | 0.2   | 0.5      | 0.5         | 0             |
| -0.8  | 0.058824 | 0.058824    | 0             | 0.25  | 0.390244 | 0.38942     | 0.000824      |
| -0.75 | 0.06639  | 0.066387    | 3e-06         | 0.3   | 0.307692 | 0.307692    | 0             |
| -0.7  | 0.075472 | 0.075472    | 0             | 0.35  | 0.246154 | 0.246268    | 0.000114      |
| -0.65 | 0.086486 | 0.086475    | 1.1e-05       | 0.4   | 0.2      | 0.2         | 0             |
| -0.6  | 0.1      | 0.1         | 0             | 0.45  | 0.164948 | 0.164865    | 8.4e-05       |
| -0.55 | 0.116788 | 0.116786    | 2e-06         | 0.5   | 0.137931 | 0.137931    | 0             |
| -0.5  | 0.137931 | 0.137931    | 0             | 0.55  | 0.116788 | 0.116786    | 2e-06         |
| -0.45 | 0.164948 | 0.164865    | 8.4e-05       | 0.6   | 0.1      | 0.1         | 0             |
| -0.4  | 0.2      | 0.2         | 0             | 0.65  | 0.086486 | 0.086475    | 1.1e-05       |
| -0.35 | 0.246154 | 0.246268    | 0.000114      | 0.7   | 0.075472 | 0.075472    | 0             |
| -0.3  | 0.307692 | 0.307692    | 0             | 0.75  | 0.06639  | 0.066387    | 3e-06         |
| -0.25 | 0.390244 | 0.38942     | 0.000824      | 0.8   | 0.058824 | 0.058824    | 0             |
| -0.2  | 0.5      | 0.5         | 0             | 0.85  | 0.052459 | 0.052457    | 2e-06         |
| -0.15 | 0.64     | 0.643169    | 0.003169      | 0.9   | 0.047059 | 0.047059    | 0             |
| -0.1  | 0.8      | 0.8         | 0             | 0.95  | 0.04244  | 0.042439    | 1e-06         |
| -0.05 | 0.941176 | 0.938866    | 0.00231       | 1     | 0.038462 | 0.038462    | 0             |
| 0     | 1        | 1           | 0             |       |          |             |               |

表 3: 三次样条插值

| t | X(t)     | Y(t)      |
|---|----------|-----------|
| 0 | 0        | 0         |
| 1 | 0.207107 | 0.207107  |
| 2 | 0        | 1         |
| 3 | -1.20711 | 1.20711   |
| 4 | -2       | 0         |
| 5 | -1.20711 | -1.20711  |
| 6 | -0       | -1        |
| 7 | 0.207107 | -0.207107 |
| 8 | 0        | -0        |

表 4: X(t) 和 Y(t) 函数值

| t | $M_x$    | $M_y$     |
|---|----------|-----------|
| 0 | 1.37932  | 0.188746  |
| 1 | -0.74415 | 1.637     |
| 2 | -2.43171 | -1.0389   |
| 3 | 0.74415  | -3.17923  |
| 4 | 3.48409  | 0         |
| 5 | 0.74415  | 3.17923   |
| 6 | -2.43171 | 1.0389    |
| 7 | -0.74415 | -1.637    |
| 8 | 1.37932  | -0.188746 |

表 5: 样条插值函数在各个采样点处的矩