计算物理第一次作业

2000012425 张弛

2023 年 1 月 4 日

1.对x从0到100，以10为步长，编写程序，比较、讨论三种计算e^{-x}的方法。

答. 程序“$HW1$计物第一题”。循环终止条件为求和相对变化量不超过10^{-12}，所得结果如下。

x	0	10	20	30	40	50
方法1	1.000e+00	4.540e-05	5.478e-10	-8.553e-05	1.470e-01	-7.016e+03
方法2	1.000e+00	4.540e-05	5.622e-09	-3.067e-05	-3.166e+00	1.107e+04
方法3	1.000e+00	4.540e-05	2.061e-09	9.358e-14	4.248e-18	1.929e-22
实际值	1.000e+00	4.540e-05	2.061e-09	9.358e-14	4.248e-18	1.929e-22
x	60	70	80	90	100	
方法1	-1.223e+09	1.514e+13	6.772e+17	-7.885e+21	-2.876e+26	
方法2	-3.352e+08	-3.298e+13	9.181e+16	-5.052e+21	-2.914e+25	
方法3	8.757e-27	3.975e-31	1.805e-35	8.194e-40	3.720e-44	
实际值	8.757e-27	3.975e-31	1.805e-35	8.194e-40	3.720e-44	

表 1: 三种方法的的计算结果

这里的实际值是用$python$库$numpy$中的自然指数$numpy.math.e$直接乘方得到的。可以看到三种方法中只有第三种的计算结果较为准确，精度至少保留四位有效数字，前两种方法在x绝对值较大时产生了显著的错误。这是因为在前两种方法的计算过程中，每一轮进行的都是减法，出现了大数相消，高位的信息丢失不断被放大，最后产生了完全错误的结果。

而前两种计算方法也有一些不同，可以发现第二种方法的计算次数比第一种方法少，这可以从计算时间的比较得到印证。

x	0	10	20	30	40	50
方法1	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	1.006e-03
方法2	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00
x	60	70	80	90	100	
方法1	0.000e+00	0.000e+00	9.971e-04	9.971e-04	9.973e-04	
方法2	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	0.000e+00	

表 2: 前两种方法的计算时间

可以看出第一种方法的用时比第二种方法的用时更多。方法二稳定性更强，不过计算结果姑且体现不出来这一点。

2.**矩阵的模和条件数** 考虑一个具体的上三角矩阵$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$，其所有对角元都为1，而所有上三角部分都为$-1$。

(a)计算矩阵A的行列式，说明A的确不是奇异矩阵。

解. 显然可以直接计算得到

$$\det A = 1 \neq 0.$$

则不是奇异矩阵。

(b)给出矩阵的逆矩阵A^{-1}的形式。

解. 可以用初等行变换的方法得到逆矩阵。

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & & -1 & 1 & 0 & 0 & & 0 \\ 0 & 1 & -1 & \cdots & -1 & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & & -1 & 0 & 0 & 1 & & 0 \\ & \vdots & & \ddots & \vdots & & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & & 0 & 1 & 1 & 2 & & 2^{n-1} \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 & 1 & \cdots & 2^{n-2} \\ 0 & 0 & 1 & & 0 & 0 & 0 & 1 & & 2^{n-3} \\ & \vdots & & \ddots & \vdots & & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}.$$

则

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 & & 2^{n-1} \\ 0 & 1 & 1 & \cdots & 2^{n-2} \\ 0 & 0 & 1 & & 2^{n-3} \\ & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}.$$

(c)如果采用矩阵p模的定义

$$\|A\|_p = \sup_{x\neq 0} \frac{\|Ax\|_p}{\|x\|_p}.$$

其中等式右边$\|\cdot\|_p$是标准定义的矢量p模，说明如果取$p \to \infty$，得到所谓∞模为，

$$\|A\|_\infty = \max_{i=1,\cdots,n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|.$$

证明. 不妨令$|x|_\infty = 1$，则

$$\begin{aligned} \|A\|_\infty &= \sup_{x\neq 0} \|Ax\|_\infty \\ &= \sup_{x\neq 0} \|\alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2 + \cdots + \alpha_n x_n\|_\infty \\ &= \sup_{x\neq 0} \max_{i=1,\cdots,n} \left| \sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j \right| \\ &\leqslant \sup_{x\neq 0} \max_{i=1,\cdots,n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij} x_j| \\ &\leqslant \sup_{x\neq 0} \max_{i=1,\cdots,n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}||x_j| \\ &\leqslant \max_{i=1,\cdots,n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| \end{aligned}$$

等号可以在$x_j = sgn(a_{ij}), j = 1 \cdots n$时取到，则

$$\|A\|_\infty = \max_{i=1,\cdots,n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|.$$

□

(d)矩阵的模有多种定义方法，一种常用的是$p = 2$的欧氏模$\|\cdot\|_2$。对于幺正矩阵$U \in \mathbb{C}^{n\times n}$，证明$\|U\|_2 = \|U^\dagger\|_2 = 1$。证明对于任意的$A \in \mathbb{C}^{n\times n}$，$\|UA\|_2 = \|A\|_2$，因此，如果利用欧氏模定义条件数，$K_2(A) = K_2(UA)$。

证明. 知有

$$\|U\|_2 = [\rho(B^\dagger B)]^{\frac{1}{2}} = 1,$$

$$\|U^\dagger\|_2 = [\rho(BB^\dagger)]^{\frac{1}{2}} = 1,$$

$$\|UA\|_2 = [\rho(A^\dagger U^\dagger UA)]^{\frac{1}{2}} = [\rho(A^\dagger A)]^{\frac{1}{2}} = \|A\|_2.$$

那么

$$K_2(UA) = \|UA\|_2\|A^{-1}U^\dagger\|_2 = \|A\|_2\|A^{-1}\|_2 = K_2(A).$$

□

(e)利用这个定义计算上面给出的具体的矩阵的条件数$K_\infty(A) = \|A\|_\infty\|A^{-1}\|_\infty$。

解. 易得

$$\|A\|_\infty = n, \|A^{-1}\|_\infty = 2^n.$$

则

$$K_2(A) = n2^n.$$

3.**Hilbert矩阵** 本题中我们将考虑一个著名的、接近奇异的矩阵，称为Hilbert矩阵。

(a)考虑区间$[0,1]$上的任意函数$f(x)$，我们试图用一个$(n-1)$次的多项式$P_n(x) = \sum_{i=1}^n c_i x^{i-1}$（从而有$n$个待定系数$c_i$）来近似$f(x)$。构建两者之间的差的平方的积分

$$D = \int_0^1 dx \left(\sum_{i=1}^n c_i x^{i-1} - f(x)\right)^2.$$

如果我们要求D取极小值，说明各个系数c_i所满足的方程为

$$\sum_{j=1}^n (H_n)_{ij} c_j = b_i,\ i = 1, \cdots, n.$$

或者简写为矩阵形式$H_n \cdot c = b$，其中$c, b \in \mathbb{R}^n$，而$H_n \in \mathbb{R}^{n\times n}$就称为$n$阶的Hilbert矩阵。给出矩阵$H_n$的矩阵元表达式和矢量$b$的表达式（用包含函数$f(x)$的积分表达）。

解. 把D视为c_i的函数，全微分

$$dD = \sum_{i=1}^n \left[\int_0^1 2dx \left(\sum_{j=1}^n c_j x^{j-1} - f(x)\right) x^{i-1}\right] dc_i.$$

得到方程组

$$\int_0^1 dx \left(\sum_{j=1}^n c_j x^{i+j-2}\right) = \int_0^1 dx f(x) x^{i-1}.$$

$$\Rightarrow \sum_{j=1}^n \frac{c_j}{i+j-1} = \int_0^1 dx f(x) x^{i-1}.$$

写成矩阵和矢量的形式

$$H_n \cdot c = b.$$

其中

$$(H_n)_{ij} = \frac{1}{i+j-1}, b_i = \int_0^1 dx f(x) x^{i-1}.$$

(b)证明矩阵H_n是对称的正定矩阵，即对于任意的$c \in \mathbb{R}^n$，说明$c^T \cdot H_n c \geqslant 0$其中等号只有当$c = 0$时才会取得。进而运用线性代数的知识论证Hilbert矩阵H_n是非奇异的。

证明. 实数域$\mathbb{R}$上的多项式环$\mathbb{R}[x]_n$构成一个实数域$\mathbb{R}$上的线性空间，在其中定义内积

$$(f(x), g(x)) = \int_0^1 f(x)g(x)dx.$$

显然$1, x, x^2, \cdots, x^{n-1}$构成一组基，考虑这组基下的度量矩阵$A$，有

$$(A)_{ij} = \int_0^1 x^{i+j-2} = \frac{1}{i+j-1}.$$

正好是Hilbert矩阵。作为一个内积在一组基下的度量矩阵，它必定是正定的。

其行列式$|H_n|$同时也是这一组基的Gram行列式，由于构成基的向量是线性无关的，因此

$$|H_n| = Gram(1, x, x^2, \cdots, x^{n-1}) > 0.$$

故非奇异。 □

(c)虽然矩阵H_n是非奇异的，但是它的行列式随着n的增加会迅速减小。事实上，它的行列式竟然有严格的表达式：

$$\det(H_n) = \frac{c_n^4}{c_{2n}},\ c_n = 1! \cdot 2! \cdots (n-1)!.$$

因此$\det(H_n)$会随着n的增加而迅速指数减小。结合上述$\det(H_n)$的表达式，估计出$\det(H_n), n \leqslant 10$的数值（【提示】：取对数）。

解. 取对数咯

$$\begin{aligned}
\ln\det(H_n) &= 4\ln c_n - \ln c_{2n} \\
&= 4\sum_{i=1}^{n-1} \ln i! - \sum_{j=1}^{2n-1} \ln j! \\
&= 4\sum_{i=2}^{n-1}\sum_{r=2}^{i} \ln r - \sum_{j=2}^{2n-1}\sum_{s=2}^{j} \ln s
\end{aligned}$$

借助程序“$HW1$计物第三题c”可以列表

n	1	2	3	4	5
ln(det)	0.000e+00	-2.485e+00	-7.678e+00	-1.562e+01	-2.631e+01
det	1.000e+00	8.333e-02	4.630e-04	1.653e-07	3.749e-12
n	6	7	8	9	10
ln(det)	-3.977e+01	-5.599e+01	-7.498e+01	-9.674e+01	-1.213e+02
det	5.367e-18	4.836e-25	2.737e-33	9.720e-43	2.164e-53

表 3: “估算”$det(H_n)$

(d)由于Hilbert矩阵的近奇异性，它具有非常巨大的条件数。因此在求解它的线性方程时，误差会被放大。为了有所体会，请写两个程序，分别利用GEM和Cholesky分解来求解线性方程$H_n \cdot x = b$，其中$b = (1, 1, \cdots, 1) \in \mathbb{R}^n$。从小的 n开始并逐步增加n（比如说一直到$n = 10$），两种方法给出的解有差别吗？如果有，你认为哪一个更为精确呢？简单说明理由。

答. 分别使用两种方法编程计算，程序“$HW1$计物第三题d”。得到结果如下。

n	index	1	2	3	4	5	6	7
1	GEM	1.000e+00						
	Cholesky	1.000e+00						
	实际值	1.000e+00						
2	GEM	-2.000e+00	6.000e+00					
	Cholesky	-2.000e+00	6.000e+00					
	实际值	-2.000e+00	6.000e+00					
3	GEM	3.000e+00	-2.400e+01	3.000e+01				
	Cholesky	3.000e+00	-2.400e+01	3.000e+01				
	实际值	3.000e+00	-2.400e+01	3.000e+01				
4	GEM	-4.000e+00	6.000e+01	-1.800e+02	1.400e+02			
	Cholesky	-4.000e+00	6.000e+01	-1.800e+02	1.400e+02			
	实际值	-4.000e+00	6.000e+01	-1.800e+02	1.400e+02			
5	GEM	5.000e+00	-1.200e+02	6.300e+02	-1.120e+03	6.300e+02		
	Cholesky	5.000e+00	-1.200e+02	6.300e+02	-1.120e+03	6.300e+02		
	实际值	5.000e+00	-1.200e+02	6.300e+02	-1.120e+03	6.300e+02		
6	GEM	-6.000e+00	2.100e+02	-1.680e+03	5.040e+03	-6.300e+03	2.772e+03	
	Cholesky	-6.000e+00	2.100e+02	-1.680e+03	5.040e+03	-6.300e+03	2.772e+03	
	实际值	-6.000e+00	2.100e+02	-1.680e+03	5.040e+03	-6.300e+03	2.772e+03	
7	GEM	7.000e+00	-3.360e+02	3.780e+03	-1.680e+04	3.465e+04	-3.326e+04	1.201e+04
	Cholesky	7.000e+00	-3.360e+02	3.780e+03	-1.680e+04	3.465e+04	-3.326e+04	1.201e+04
	实际值	7.000e+00	-3.360e+02	3.780e+03	-1.680e+04	3.465e+04	-3.326e+04	1.201e+04

表 4: 两种方法的计算结果

n	index	1	2	3	4	5
8	GEM	-8.000e+00	5.040e+02	-7.560e+03	4.620e+04	-1.386e+05
	Cholesky	-8.000e+00	5.040e+02	-7.560e+03	4.620e+04	-1.386e+05
	实际值	-8.000e+00	5.040e+02	-7.560e+03	4.620e+04	-1.386e+05
	index	6	7	8	9	10
	GEM	2.162e+05	-1.682e+05	5.148e+04		
	Cholesky	2.162e+05	-1.682e+05	5.148e+04		
	实际值	2.162e+05	-1.682e+05	5.148e+04		
9	GEM	9.000e+00	-7.200e+02	1.386e+04	-1.109e+05	4.504e+05
	Cholesky	9.000e+00	-7.200e+02	1.386e+04	-1.109e+05	4.504e+05
	实际值	9.000e+00	-7.200e+02	1.386e+04	-1.109e+05	4.504e+05
	index	6	7	8	9	10
	GEM	-1.009e+06	1.261e+06	-8.237e+05	2.188e+05	
	Cholesky	-1.009e+06	1.261e+06	-8.237e+05	2.188e+05	
	实际值	-1.009e+06	1.261e+06	-8.237e+05	2.188e+05	

表 5: 两种方法的计算结果（续表）

n	index	1	2	3	4	5
10	GEM	-9.998e+00	9.898e+02	-2.376e+04	2.402e+05	-1.261e+06
	Cholesky	-9.998e+00	9.898e+02	-2.376e+04	2.402e+05	-1.261e+06
	实际值	-1.000e+01	9.900e+02	-2.376e+04	2.402e+05	-1.261e+06
	index	6	7	8	9	10
	GEM	3.783e+06	-6.726e+06	7.001e+06	-3.938e+06	9.237e+05
	Cholesky	3.783e+06	-6.726e+06	7.001e+06	-3.938e+06	9.237e+05
	实际值	3.784e+06	-6.727e+06	7.001e+06	-3.938e+06	9.238e+05

表 6: 两种方法的计算结果（续续表）

其中*GEM*方法中的三角化过程，使用的是完全支点遴选，实际值是用*python*库*numpy*中的线性方程求解函数*numpy.linalg.solve*得到的。两种方法得到的结果几乎没有差别，而且直到$n = 10$才与实际值出现分歧。

试试更大的n，当$n = 11$时得到结果如下。

n	index	1	2	3	4	5	6
11	GEM	1.095e+01	-1.315e+03	3.848e+04	-4.790e+05	3.144e+06	-1.208e+07
	Cholesky	1.096e+01	-1.316e+03	3.850e+04	-4.792e+05	3.146e+06	-1.208e+07
	实际值	1.102e+01	-1.322e+03	3.866e+04	-4.811e+05	3.157e+06	-1.212e+07
	index	7	8	9	10	11	
	GEM	2.852e+07	-4.192e+07	3.734e+07	-1.844e+07	3.873e+06	
	Cholesky	2.853e+07	-4.193e+07	3.735e+07	-1.845e+07	3.874e+06	
	实际值	2.861e+07	-4.204e+07	3.744e+07	-1.849e+07	3.883e+06	

表 7: 两种方法的计算结果（续续表）

两种方法开始出现了差别，看出*Cholesky*更接近实际值一点，这是因为*GEM*本质是*LU*分解，而*Cholesky*方法比*LU*方法计算次数大约节省一半，故*Cholesky*方法稳定性更好，误差更小。

4.**级数求和与截断误差** 计算级数与积分的差

$$f(q^2) = \left(\sum_{\boldsymbol{n}\in\mathbb{Z}^3} - \int d^3\boldsymbol{n}\right)\frac{1}{|\boldsymbol{n}|^2 - q^2},$$

这里$\mathbb{Z}$为三维矢量的集合，当$\boldsymbol{n} = (n_1, n_2, n_3) \in \mathbb{Z}^3$时，$n_1, n_2, n_3$全为整数。

(a)请求出$f(q^2)$在$q^2 = 0.5$处的值。

解. 瑕积分可以比较容易地处理，是主值收敛意义下的结果。取截断上限为Λ。

$$\begin{aligned}
&\int d^3\boldsymbol{n}\frac{1}{|\boldsymbol{n}|^2 - 0.5}\\
=&4\pi\int_0^\Lambda \frac{r^2dr}{r^2 - 0.5}\\
=&4\pi\int_0^\Lambda (dr + \frac{0.5dr}{r^2 - 0.5})\\
=&4\pi\Lambda + \sqrt{2}\pi\ln\frac{\sqrt{2}\Lambda - 1}{\sqrt{2}\Lambda + 1}.
\end{aligned}$$

级数借助程序求和，源代码已经丢失，反正没有价值。取截断为$\Lambda = 500, 1000, 1500, 2000$，得到差值的结果如下。

Λ	500	1000	1500	2000
result	1.0794212099026481	1.0974490844291722	1.0954779751773458	1.0985571508099383

表 8: 计算结果

由于穷举复杂度过高，仅计算到$\Lambda = 2000$.

寻求到了更好的方法，打算直接从第三小题开始写。

(c)有没有办法改变$f(q^2)$的表达形式，使得计算$f(q^2)$的效率远高于题干中公式给出的级数求和的效率。

解. 主要考虑改变级数的形式。设

$$g(q, \boldsymbol{r}) = \sum_{\boldsymbol{n}\in\mathbb{Z}^3} \frac{e^{i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r}}}{|\boldsymbol{n}|^2 - q^2}.$$

进行一些变换

$$\begin{aligned}
g(q, \boldsymbol{r}) &= \sum_{\boldsymbol{n}\in\mathbb{Z}^3} \frac{e^{i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r}}}{|\boldsymbol{n}|^2 - q^2} \\
&= \sum_{\boldsymbol{n}\in\mathbb{Z}^3} \frac{e^{i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r}} e^{-(|\boldsymbol{n}|^2 - q^2)}}{|\boldsymbol{n}|^2 - q^2} + \sum_{\boldsymbol{n}\in\mathbb{Z}^3} \frac{e^{i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r}}[1 - e^{-(|\boldsymbol{n}|^2 - q^2)}]}{|\boldsymbol{n}|^2 - q^2} \\
&= \sum_{\boldsymbol{n}\in\mathbb{Z}^3} \frac{e^{i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r}} e^{-(|\boldsymbol{n}|^2 - q^2)}}{|\boldsymbol{n}|^2 - q^2} + \sum_{\boldsymbol{n}\in\mathbb{Z}^3} \int_0^1 dt e^{i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r} - t(|\boldsymbol{n}|^2 - q^2)} \\
&= \sum_{\boldsymbol{n}\in\mathbb{Z}^3} \frac{e^{i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r}} e^{-(|\boldsymbol{n}|^2 - q^2)}}{|\boldsymbol{n}|^2 - q^2} + \int_0^1 dt e^{tq^2} \sum_{\boldsymbol{n}\in\mathbb{Z}^3} e^{i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r} - t|\boldsymbol{n}|^2}.
\end{aligned}$$

第二项中的求和用$Poisson$求和公式

$$\begin{aligned}
\sum_{\boldsymbol{n}\in\mathbb{Z}^3} e^{i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r} - t|\boldsymbol{n}|^2} &= \sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{Z}^3} \mathcal{F}(e^{i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r} - t|\boldsymbol{n}|^2}) \\
&= \sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{Z}^3} \int d^3\boldsymbol{n} e^{i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r} - t|\boldsymbol{n}|^2} e^{-2\pi i\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{n}} \\
&= \sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{Z}^3} \int d^3\boldsymbol{n} e^{i\boldsymbol{n}\cdot(\boldsymbol{r} - 2\pi\boldsymbol{n}) - t|\boldsymbol{n}|^2} \\
&= \sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{Z}^3} 2\pi \int_0^\infty dn n^2 \int_0^\pi d\theta \sin\theta e^{i|\boldsymbol{r} - 2\pi\boldsymbol{m}| n\cos\theta - t|\boldsymbol{n}|^2} \\
&= \sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{Z}^3} 2\pi \int_0^\infty dn n^2 \frac{2\sin(|\boldsymbol{r} - 2\pi\boldsymbol{m} n)}{|\boldsymbol{r} - 2\pi\boldsymbol{m}| n} e^{-tn^2} \\
&= \sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{Z}^3} \left(\frac{\pi}{t}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{|\boldsymbol{r} - 2\pi\boldsymbol{m}|^2}{4t}}.
\end{aligned}$$

那么上面那个函数可以继续往下写

$$\begin{aligned}
g(q, \boldsymbol{r}) &= \sum_{\boldsymbol{n}\in\mathbb{Z}^3} \frac{e^{i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r}} e^{-(|\boldsymbol{n}|^2 - q^2)}}{|\boldsymbol{n}|^2 - q^2} + \int_0^1 dt e^{tq^2} \sum_{\boldsymbol{n}\in\mathbb{Z}^3} e^{i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r} - t|\boldsymbol{n}|^2} \\
&= \sum_{\boldsymbol{n}\in\mathbb{Z}^3} \frac{e^{i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r}} e^{-(|\boldsymbol{n}|^2 - q^2)}}{|\boldsymbol{n}|^2 - q^2} + \int_0^1 dt e^{tq^2} \sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{Z}^3} \left(\frac{\pi}{t}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{|\boldsymbol{r} - 2\pi\boldsymbol{m}|^2}{4t}}.
\end{aligned}$$

令$\boldsymbol{r} = 0$，则得到

$$g(q, \boldsymbol{0}) = \sum_{\boldsymbol{n}\in\mathbb{Z}^3} \frac{e^{-(|\boldsymbol{n}|^2 - q^2)}}{|\boldsymbol{n}|^2 - q^2} + \int_0^1 dt e^{tq^2} \sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{Z}^3} \left(\frac{\pi}{t}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\pi^2|\boldsymbol{m}|^2}{t}}.$$

其中第二项的积分在$\boldsymbol{m}=0$情形不收敛，需要对原问题中的积分也进行边。设

$$h(q,\boldsymbol{r})=\int d^3\boldsymbol{n}\frac{e^{i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r}}}{|\boldsymbol{n}|^2-q^2}.$$

进行变形

$$\begin{aligned}
h(q,\boldsymbol{r}) &= 2\pi\int_0^\infty dnn^2\int_0^\pi d\theta\sin\theta\frac{e^{inr\cos\theta}}{n^2-q^2}\\
&= 4\pi\int_0^\infty dnn^2\frac{\sin(nr)}{nr}\frac{1}{n^2-q^2}\\
&= \frac{2\pi}{r}\int_{-\infty}^\infty dn\frac{n\sin(nr)}{n^2-q^2}\\
&= \frac{2\pi}{r}\Im\left(\int_{-\infty}^\infty dn\frac{ne^{inr}}{n^2-q^2}\right)\\
&= \frac{2\pi^2\cos qr}{r}\\
&= \frac{2\pi^2}{r}+O(r)\\
&= \int_0^\infty dt\left(\frac{\pi}{t}\right)^{\frac{3}{2}}e^{-\frac{r^2}{4t}}+O(r).
\end{aligned}$$

级数与积分相减

$$\begin{aligned}
g(q,\boldsymbol{r})-h(q,\boldsymbol{r}) &= \sum_{\boldsymbol{n}\in\mathbb{Z}^3}\frac{e^{i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r}}e^{-(|\boldsymbol{n}|^2-q^2)}}{|\boldsymbol{n}|^2-q^2}+\int_0^1 dte^{tq^2}\sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{Z}^3}\left(\frac{\pi}{t}\right)^{\frac{3}{2}}e^{-\frac{|\boldsymbol{r}-2\pi\boldsymbol{m}|^2}{4t}}-\int_0^\infty dt\left(\frac{\pi}{t}\right)^{\frac{3}{2}}e^{-\frac{r^2}{4t}}+O(r)\\
&= \sum_{\boldsymbol{n}\in\mathbb{Z}^3}\frac{e^{i\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r}}e^{-(|\boldsymbol{n}|^2-q^2)}}{|\boldsymbol{n}|^2-q^2}+\int_0^1 dte^{tq^2}\sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{Z}^3,\boldsymbol{m}\neq0}\left(\frac{\pi}{t}\right)^{\frac{3}{2}}e^{-\frac{|\boldsymbol{r}-2\pi\boldsymbol{m}|^2}{4t}}-\int_1^\infty dt\left(\frac{\pi}{t}\right)^{\frac{3}{2}}e^{-\frac{r^2}{4t}}\\
&\quad+\int_0^1 dt(e^{tq^2}-1)\left(\frac{\pi}{t}\right)^{\frac{3}{2}}e^{-\frac{r^2}{4t}}+O(r).
\end{aligned}$$

令$\boldsymbol{r}=0$，得到原问题的另一形式

$$\begin{aligned}
f(q^2) &= g(q,\boldsymbol{0})-h(q,\boldsymbol{0})\\
&= \sum_{\boldsymbol{n}\in\mathbb{Z}^3}\frac{e^{-(|\boldsymbol{n}|^2-q^2)}}{|\boldsymbol{n}|^2-q^2}+\int_0^1 dte^{tq^2}\sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{Z}^3,\boldsymbol{m}\neq0}\left(\frac{\pi}{t}\right)^{\frac{3}{2}}e^{-\frac{\pi^2|\boldsymbol{m}|^2}{t}}-\int_1^\infty dt\left(\frac{\pi}{t}\right)^{\frac{3}{2}}+\int_0^1 dt(e^{tq^2}-1)\left(\frac{\pi}{t}\right)^{\frac{3}{2}}+O(r)\\
&= \sum_{\boldsymbol{n}\in\mathbb{Z}^3}\frac{e^{-(|\boldsymbol{n}|^2-q^2)}}{|\boldsymbol{n}|^2-q^2}+\int_0^1 dte^{tq^2}\sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{Z}^3,\boldsymbol{m}\neq0}\left(\frac{\pi}{t}\right)^{\frac{3}{2}}e^{-\frac{\pi^2|\boldsymbol{m}|^2}{t}}-2\pi^{\frac{3}{2}}e^{q^2}+2\pi^2q\ Erfi(q).
\end{aligned}$$

该式中的求和项均存在负指数，收敛更快，在同样的误差要求下，截断半径更小，计算效率更高。

(b)引入截断Λ使得$|\boldsymbol{n}|\leqslant\Lambda$。要使$f(q^2=0.5)$的计算精度达到$10^{-5}$，需要$\Lambda$多大？

解. 稍微估计一下截断半径球外的求和的值，近似为积分即可。

$$\begin{aligned}
&\sum_{\boldsymbol{n}\in\mathbb{Z}^3,|\boldsymbol{n}|\geqslant\Lambda}\frac{e^{-(|\boldsymbol{n}|^2-q^2)}}{|\boldsymbol{n}|^2-q^2}+\int_0^1 dte^{tq^2}\sum_{\boldsymbol{m}\in\mathbb{Z}^3,\boldsymbol{m}\geqslant\Lambda}\left(\frac{\pi}{t}\right)^{\frac{3}{2}}e^{-\frac{\pi^2|\boldsymbol{m}|^2}{t}}\\
=&4\pi\int_\Lambda^\infty dnn^2\frac{e^{-(n^2-q^2)}}{n^2-q^2}+\int_0^1 dte^{tq^2}4\pi\int_\Lambda^\infty dn\left(\frac{\pi}{t}\right)^{\frac{3}{2}}n^2e^{-\frac{\pi^2|\boldsymbol{n}|^2}{t}}\\
\approx&4\pi\int_\Lambda^\infty dne^{-(n^2-q^2)}+\int_0^1 dte^{tq^2}4\pi\int_\Lambda^\infty dn\left(\frac{\pi}{t}\right)^{\frac{3}{2}}n^2e^{-\frac{\pi^2|\boldsymbol{n}|^2}{t}}\\
=&2\pi^{\frac{3}{2}}e^{q^2}Erfc(\Lambda)+\int_0^1 dte^{tq^2}4\pi\left(\frac{\pi}{t}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{e^{-\frac{\pi^2\Lambda^2}{t}}t\Lambda}{2\pi^2}+\frac{t^{3/2}Erfc\left(\frac{\pi\Lambda}{\sqrt{t}}\right)}{4\pi^{5/2}}\right)\\
\approx&2\pi^{\frac{3}{2}}e^{q^2}Erfc(\Lambda).
\end{aligned}$$

大约截断在$\Lambda = 4$就能获得10^{-5}的精度。借由程序"$HW1$计物第四题"可得到如下结果

Λ	1	2	3	4	5	6
result	-1.0722215	1.0272587	1.1059429	1.1062141	1.1062144	1.1062144

表 9: 不同截断所得结果

可以看出在$\Lambda = 4$时计算所得精度就能达到10^{-5}，值为1.10621。

(a)请求出$f(q^2)$在$q^2 = 0.5$处的值。

答. 不可能有精确值。