计算物理开卷考试题

（请完成所有题目，要求与彭老师的相同!）

1. **表针三等分表盘问题（20 分）** 考虑一个标准的 (也就是无限精确的)、具有三个指针 (俗称时针、分针、秒针) 的钟表。我们假定三个表针都是连续转动的。在零点钟表的三个表针是重合的，我们从这时起开始计时。我们将利用计算机来确定，是否在 12 小时内有一个时刻 t，上述三个指针恰好三等分表盘，即它们两两之间的夹角 (不管顺序) 恰好是 $2\pi/3$。如果有这样的时刻存在，请给出这个时刻的具体数值 (以小时为单位，准到 6 位有效数字)；如果不存在这样的时刻，说明为什么不存在；并请给出“最接近”三等分表盘的时刻 (同样以小时为单位，准到 6 位有效数字)。其中“最接近”可以要求两两之间的夹角与 $2\pi/3$ 的差在平方和的意义下最小。如果令 h，m，s 分别表示时针、分针、秒针的转角，我们约定它们的主值取值都在 $[0, 2\pi)$ 之间，但是 m 和 s 的取值是需要模掉 2π 的整数倍的。那么我们需要求极小的函数大致是 (假定顺时针顺序为时、秒、分)：

$$[f(h,m,s)]^2 \equiv \left(h - s - \frac{2\pi}{3}\right)^2 + \left(m - h - \frac{2\pi}{3}\right)^2 + \left(s - m + \frac{4\pi}{3}\right)^2 . \quad (1)$$

类似地，你还需要考虑其他可能的组合。请画出你构造的函数 f 作为时间 $t \in [0, 12]$ 的函数以说明你的解答。给出极小值相应的函数值 f(也准到 6 位有效数字)。这个最小的函数值，如果换算成度大约是多少呢？另外，这个解是唯一的吗？

2. **含有 zeta 函数的方程求解（30 分）** 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：

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

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 次其次函数 (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]

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

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 (3) 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：

$$\pi^{3/2} q \cot\delta_0(q^2) = \mathcal{Z}_{00}(1;q^2)\ . \tag{4}$$

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

$$q\cot\delta_0(q^2) = \frac{1}{A_0} + \frac{R_0}{2}q^2 + \cdots\ , \tag{5}$$

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)。

3. *关联函数的拟合与数据分析（50 分）* 请根据下载的数据文件 (它来自一个真实的格点 QCD 的 Monte Carlo 数值模拟)，通过拟合确定 π 介子的质量及其误差。[2] 数据文件的名称为"pion-correlation-function.dat"，可以按照通常的文本处理软件（比如写字板）打开。

【这是什么 0】：在格点场论中我们感兴趣所谓的虚时关联函数 (或格林函数)$C(t)$，这是一个实函数，它的量子力学表达式为：$C(t) = \langle O(t)O(0)^\dagger\rangle$，其中 t 称为时间间隔，可以取一系列分立的数值 $t = 0, 1, \cdots, N_t - 1$，其中 N_t 为虚时方向的时间片的数目；$O(t)$ 以及 $O^\dagger(t)$ 是互为厄米共轭的两个算符；[3] $\langle\cdot\rangle$ 表示对某个特定的概率分布 (就是与 QCD 对应的规范场组态分布) 的期望值。

【文件的格式】：数据文件中包含的是函数 $C(t)$ 在统计独立的 N 个测量中给出的数值。每一次测量，我们称之为一个特定的组态。对于这个特例，组态的数目 $N = 250$，时间片的数目 $N_t = 64$，这些信息都包含在文件的第一行中。从第二行直到文件的最后，第一、第二、第三列的数据分别是 t，$C(t)$ 的实部，以及 $C(t)$ 的虚部。[4] 换句话说，文件从第二行到最后，包含了 $N = 250$ 个 block，每个 block 对应于一次测量；在每一个 block 之内，我们测量了 $N_t = 64$ 个物理量 $C(t)$。我们将第 i 次测量的在时间片 t 上的函数值记为 $C^{(i)}_{\rm raw}(t)$，其中 $i = 1, \cdots, 250$ 标记不同的测量，$t = 0, 1, \cdots, 63$ 则标记不同的时间片 t。

【这是什么 1】：这个函数 $C(t)$ 测量的是格点量子色动力学中 π 介子 (pion) 的关联函数。理论上我们知道，它的形式一定为：

$$C(t) = \sum_{n=0} A_n\left(e^{-E_n t} + e^{-E_n(N_t - t)}\right) = \sum_{n=0} A_n e^{-E_n N_t/2}\cosh\left[E_n\left(\frac{N_t}{2} - t\right)\right]\ , \tag{6}$$

[2]【注意】，由于已经采用了格点单位制 (就是自然单位制加上取格距 a 为长度单位)，因此本题目中所有物理量 (质量、时间等等) 都是无量纲的纯数。

[3]可以认为 $O^\dagger(t)$ 是在时间片 t 处产生一个 π 介子的算符，相应的 $O(t)$ 是湮灭一个 π 介子的算符

[4]应当为零，但是由于 roundoff 误差并不为零，但这一列数据基本上可以忽略。

其中 E_n，$n=0,1,\cdots$ 是具有 π 介子量子数的不同量子态的、分立的能量，它们是按照单调递增的顺序排好的：$E_0 < E_1\cdots$，其中最低的能量 $E_0 \equiv m_\pi$ 就是 π 介子的质量，也就是我们这个题目中需要寻找的主要对象。本题中我们假定 $m_\pi N_t \gg 1$。由于在虚时方向的周期性边条件，函数 $C(t)$ 关于 $t=N_t/2$ 应当是对称的，即 $C(t)=C(N_t-t)$。为此，我们首先构建对称化的函数的值，令

$$
\begin{aligned}
C^{(i)}(0) &= C^{(i)}(N_t) = C^{(i)}_{\text{raw}}(0) & (7)\\
C^{(i)}(t) &= C^{(i)}(N_t-t) = \frac{1}{2}\left(C^{(i)}_{\text{raw}}(t)+C^{(i)}_{\text{raw}}(N_t/2-t)\right)\ ,t=1,2,\cdots,N_t/2\ . & (8)
\end{aligned}
$$

这样一来，对于每一次测量我们就得到 $N_t/2+1=33$ 个测量值，并且 $C^{(i)}(t)$ 已经自动满足 $C^{(i)}(t)=C^{(i)}(N_t-t)$。

【要做什么】：本题以下各问的主要目的是通过对关联函数 $C(t)$ 的误差的正确估计，以及对不同时间片上测量的统计关联的考虑，利用拟合的方法获得 π 介子的质量 (包括其中心值和误差)。

(a) 首先利用样本平均值来估计函数 $C(t)$ 的中心值：

$$\bar{C}(t)=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}C^{(i)}(t)\ ,t=0,\cdots,N_t/2\ . \tag{9}$$

其中 $C^{(i)}(t)$ 是 (对称化操作后的) 第 t 个时间片上第 i 次测量获得的数值。忽略不同次测量之间的统计关联 (serial correlation)，估计出每个时间片 t 上的这个函数的误差 $\Delta C(t)$。注意，随着时间片 t 的增加，函数 $C(t)$ 的信噪比逐渐变差。根据你的分析，给出相对误差 $\Delta C(t)/\bar{C}(t)$ 作为 t 的函数 (用百分误差表示)。

(b) 我们的目的是希望抽取公式 (6) 中的 π 介子的质量 m_π 并合理估计其误差。一种办法是注意到函数的表达式中在 $1\ll t\ll N_t/2$ 的时候可以近似利用单指数衰减来近似：$C(t)\sim e^{-m_\pi t}$。为此我们可以构建所谓的有效质量函数，

$$m_{\text{eff}}(t)=\ln\mathcal{R}(t)=\ln\frac{C(t)}{C(t+1)}\approx\ln\frac{\bar{C}(t)}{\bar{C}(t+1)}\ ,t=0,1,\cdots,t_0 \tag{10}$$

在前面的时间片，由于有高激发态 (即 $n>0$ 的态) 的污染，因此 $m_{\text{eff}}(t)$ 并不是常数；对于比较大的时间片 $t\gg 1$，这时关联函数由一个指数衰减函数所主导，因此 $m_{\text{eff}}(t)$ 会趋于一个常数，即 m_π，这就是我们所说的平台区域；在这个区域中，我们将试图通过拟合找到最佳的平台值 m_π；但如果时间片过大，则由于关联函数的信噪比变差，我们将无法有效确定质量。因此对于已给的数据，对每一个时间片 $t=0,\cdots,t_0$(其中 t_0 基本上是误差超过其信号的时间片)，我们可以构建一个有效质量函数 $m_{\text{eff}}(t)=\ln\frac{\bar{C}(t)}{\bar{C}(t+1)}$，利用 Jackknife 的方法 (即

每次剔除其中一个组态的方法) 估计其误差 $\Delta m_{\text{eff}}(t)$。以 t 为横轴，以 $m_{\text{eff}}(t)$ 为纵轴，用散点图的形式画出这些有效质量的数值及其误差。[5]

(c) 有没有观察到在中间有一段所有的点都趋于一个常数？为了确定这个常数及其误差，我们需要一个单参数拟合。利用上问得到的有效质量及其误差，忽略 ratio 的各个时间片的统计关联，那么一个合适的 χ^2 的表达式为：

$$\chi^2 = \sum_{t=t_{\min}}^{t_{\max}} \left(\frac{m_{\text{eff}}(t) - m_\pi}{\Delta m_{\text{eff}}(t)} \right)^2 , \tag{11}$$

其中 $t_{\min}$，$t_{\max}$ 分别为拟合的起始点和结束点。对 χ^2 的有贡献的点一共是 $t_{\max} - t_{\min} + 1$ 个，而自由度数目为 $d = t_{\max} - t_{\min}$。按照每个自由度的 χ^2 最小进行拟合 (但要求最少有连续 4 个点，让计算机扫描确定起始和终止的时间片) 给出相应的拟合值 m_π 并给出其误差估计。将这个拟合值 (包括相应的拟合区间 $[t_{\min}, t_{\max}]$) 及其误差与上问的数据点们画在一起吧。你的最小 $\chi^2/d.o.f$ 相应的 p-value 是多少？

(d) 上面我们讨论的 ratio 方法只适用于平台搜寻区间比较靠前 (远离 $N_t/2$) 的情形，这时公式 (6) 中第二项的贡献可以忽略。但是如果你最终寻找平台的区间比较接近 $N_t/2$，那么上述 ratio 的方法就不可行了。这时应当构建一个新的 ratio：

$$\tilde{\mathcal{R}}(t) = \frac{C(t+1) + C(t-1)}{2C(t)} \; , t = 1, 2, \cdots, N_t/2 - 1 \; . \tag{12}$$

考察公式 (6) 可以发现，在只有一个能级 $E_0 = m_\pi$ 贡献的时候，这个 ratio 的值应当为 $\cosh m_\pi$。所以我们可以定义新的有效质量 $\tilde{m}_{\text{eff}}(t)$ 为：

$$\tilde{m}_{\text{eff}}(t) = \cosh^{-1}(\tilde{\mathcal{R}}(t)) \; . \tag{13}$$

这个公式可以一直工作到接近 $N_t/2$。然后可以重复上面 b) 和 c) 中的步骤进行拟合，这样得到的 m_π 及其误差各有何变化？

(e) 虽然不同次测量之间的关联可以忽略，但是同一次测量的不同物理量之间却有着很强的关联。特别是对于相邻的时间片的关联函数来说更是如此。具体来说，利用数据估计出不同时间片之间函数 $C(t)$ 的协方差矩阵：

$$\mathcal{C}_{t,t'} = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^{N} \left(C^{(i)}(t) - \bar{C}(t) \right) \left(C^{(i)}(t') - \bar{C}(t') \right) \tag{14}$$

其中 $t, t' = 0, 1, \cdots, N_t/2$。这是一个对称正定实矩阵，其对角元 $\mathcal{C}_{t,t}$ 就与 a) 问中估计的 $C(t)$ 的误差相关。这个矩阵对于我们后面的关联拟合将会起重要作

[5]特别注意，按照公式 (10)，有效质量 $m_{\text{eff}}(t)$ 的中心值直接联系着关联函数 (即平均值) 的比值，而不是比值的平均值。在利用 Jackknife 的计算 $\Delta m_{\text{eff}}(t)$ 时，你可以每次剔除掉一个组态，比如说第 i 个组态，然后按照公式 (10) 计算剔除了第 i 个组态后其他所有组态给出的有效质量 $m_{\text{eff}}^{(i)}(t)$，然后根据它对于不同 i 的弥散程度来估计误差 $\Delta m_{\text{eff}}(t)$。

用。一个归一化的衡量其相关性的量是相关系数矩阵 $\rho_{t,t'}$：

$$\rho_{t,t'} = \mathcal{C}_{t,t'}/\sqrt{\mathcal{C}_{t,t}\mathcal{C}_{t',t'}} \; . \tag{15}$$

请利用 $N_B = 1000$ 个 bootstrap sample 来估计 $\rho_{3,4}$ 和 $\rho_{3,5}$ 的中心值及误差。

(f) 我们也可以利用函数形式 (6) 直接进行拟合。假设仅仅取其中主导的一项：

$$C_1(t; A_0, m_\pi) = A_0(e^{-m_\pi t} + e^{-m_\pi(N_t-t)}) \; , \tag{16}$$

它包含两个参数 A_0 和 m_π。由于 e) 问中的关联，我们必须进行关联拟合。为此我们构建 χ^2 如下：

$$\chi^2 = \sum_{t,t'\in I} \left(C_1(t; A_0, m_\pi) - \bar{C}(t)\right) \mathcal{C}^{-1}_{t,t'} \left(C_1(t'; A_0, m_\pi) - \bar{C}(t')\right) \; . \tag{17}$$

其中的 $I = [t_{\text{min}}, t_{\text{max}}]$ 是一个适当选取的拟合区间。[6] 对这个 χ^2 取极小就可以获得参数 A_0 以及 m_π 的中心值和误差。但是在此之前需要对公式 (14) 中给出的协方差矩阵求逆。利用我们课上讲过的任何一种你认为可靠的方法 (QR, SVD, Cholesky, Jacobi, 等，但请明确说明你用了什么方法) 将 $\mathcal{C}_{t,t'}$ 对角化：

$$\sum_{t,t'} (U^\dagger)_{t_1,t}\mathcal{C}_{t,t'}U_{t',t_2} = (\Sigma)_{t_1,t_2} \equiv \sigma_{t_1}\delta_{t_1,t_2} \; , \tag{18}$$

其中对角元 σ_{t_1} 均为正实数而 U 是一个 (幺正) 正交矩阵。利用 $(\Sigma^{-1})_{t_1,t_2} = (1/\sigma_{t_1})\delta_{t_1,t_2}$，我们可以求出逆矩阵 $\mathcal{C}^{-1}$：

$$\mathcal{C}^{-1} = (U\Sigma^{-1}U^\dagger) \; . \tag{19}$$

(g) 在你选择的区间 I 中进行关联拟合，通过对公式 (17) 中的 χ^2 取极小值以获得参数 A_0 和 m_π 的估计值 (中心值)、误差以及两者的关联。将此问中的结果与前面几问的结果进行比较。[7]

---

[6] 一般来说你可以选择全区间 $I_0 \equiv [0, N_t/2]$，那么矩阵 $\mathcal{C}_{t,t'}$ 以及它的逆都是 33×33 的矩阵。但是我们期待拟合公式 (16) 应当仅仅在中间的一段是恰当的。因此，你可以通过考察数据的行为，你也可以确定一个子区间 $I = [t_{\text{min}}, t_{\text{max}}] \subset I_0$，从而适当缩小矩阵的规模。

[7] 由于这是一个非线性拟合，你可以运用其他的现成的拟合程序。不过请说明你用的是什么程序和算法。