计算物理第一次作业第四题的数学推导

计算物理助教,[1*]

[1]Department of Physics, Peking University

[*]E-mail: pkunumerical2020@163.com

本次作业第四题涉及较多数学推导，由于大多属于技术细节，且与本计算物理课程无关，助教在习题课上讲不再具体推导。但由于大多数学技巧应是理科学习的基础，同学们很多也是第一次遇到，故在这里整理一下，方便同学们参考。

1 关于 Latex 的书写

LaTeX 是一种排版系统，它非常适用于生成高印刷质量的科技和数学类文档，本次作业中同学们也有大量使用，但初学 LaTeX 的同学往往有一些书写的不规范，尽管不影响助教阅读，但总感觉有些不爽，例如对于积分号\int \int 与\int \!\!\! \int 的区别：

$$\int \int \text{or} \iint \tag{1}$$

其中\!\!\! 用于减小两个积分号之间的距离。明显第二种更符合物理书写的规范。还有很多同学将积分号之后的微分号直接写为 dt，这样得到两个英文字母的字体是相同的，但通常为了表明d 的微分算子的特殊地位，更符合书写规范的是 $\mathrm{d}t$，使二者有明显区别：

$$\int dt \to \int \mathrm{d}t \tag{2}$$

还有很多基本的书写规定，事实上所有的函数名都应该放在 $\mathrm{}$ 里，例如

$$cos(x) \to \cos(x),\ log(x) \to \log(x) \tag{3}$$

以便将“函数”与“变量”完全区分开。初学的同学推荐在网上搜一下《一份不太简短的 LATEX 2 介绍》，进行一遍系统的学习，里面的数学符号表可能是非常有用的。

2 原问题

4. **级数求和与截断误差**

   计算级数与积分的差

$$f(q^2) = \left(\sum_{\vec{n}\in\mathbb{Z}^3} - \int d^3\vec{n}\right)\frac{1}{|\vec{n}|^2 - q^2}, \tag{10}$$

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

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

   (c) 有没有办法改变 $f(q^2)$ 的表达形式，使得计算 $f(q^2)$ 的效率远高于公式 (10) 给出的级数求和的效率。

3 4(a)

回归正题，本题的题干要求计算有限体积误差

$$f(q) = \sum_n \frac{1}{|\vec{n}|^2 - q^2} - \mathrm{P.V.}\int \mathrm{d}^3n \frac{1}{|\vec{n}|^2 - q^2} \tag{4}$$

其中第二项连续积分是可以手算出来的，在取主值积分和 Λ 截断下是个有限值

$$\begin{aligned}
\mathrm{P.V.}\int \mathrm{d}^3n \frac{1}{|\vec{n}|^2 - q^2} &= \mathrm{P.V.}\int_0^\Lambda \frac{4\pi r^2}{r^2 - q^2}\mathrm{d}r && (5)\\
&= 4\pi\left(\int_0^{q-\epsilon} + \int_{q+\epsilon}^\Lambda\right)\frac{r^2}{r^2 - q^2}\mathrm{d}r && (6)\\
& && (7)
\end{aligned}$$

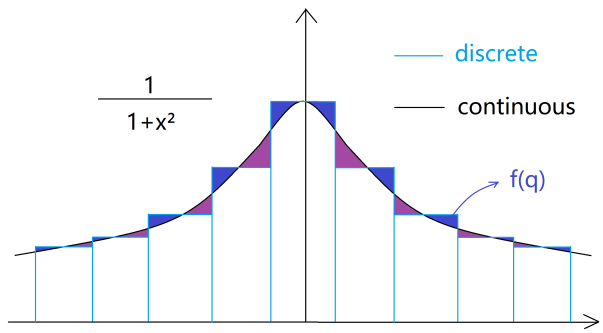

图 1: 离散求和与连续积分之差的图示

其中被积函数分解为 $\frac{r^2}{r^2-q^2}=1+\frac{q^2}{r^2-q^2}=1+\frac{q}{2}(\frac{1}{r-q}-\frac{1}{r+q})$ 即可化为初等积分，两个积分的结果分别是

$$0\sim q-\epsilon:4\pi\left[q-\epsilon+\frac{q}{2}\ln|\frac{\epsilon}{2q-\epsilon}|\right] \tag{8}$$

$$q+\epsilon\sim\Lambda:4\pi\left[\Lambda-q-\epsilon+\frac{q}{2}(\ln|\frac{\Lambda-q}{\epsilon}|-\ln|\frac{\Lambda+q}{2q+\epsilon}|)\right] \tag{9}$$

求和并取 $\epsilon\to 0$ 可得最终结果为

$$\int \mathrm{d}^3n\frac{1}{|\vec{n}|^2-q^2}=4\pi\left[\Lambda+\frac{q}{2}\ln(\frac{\Lambda-q}{\Lambda+q})\right] \tag{10}$$

运用此表达式配合相同截断的格点求和即可计算题目中的 $f(q)$

4 4(b)：量级估计方法

考虑 Λ 截断处的一个边长为 1 的正方体小格内的 $f(q)$，离散求和与连续积分之间的差为：

$$\int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}\mathrm{d}r\left(\frac{1}{(\Lambda+r)^2-q^2}-\frac{1}{\Lambda^2-q^2}\right) \tag{11}$$

其中第一项表小方格内的连续积分，第二项为离散求和中的一项（见图 (4)）。因 $\Lambda\gg r,1$，可用泰勒展开为

$$\int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}}\mathrm{d}r\ \frac{1}{\Lambda^2-q^2}\left[-\frac{2r}{\Lambda}+\frac{3r^2}{\Lambda^2}+\mathcal{O}(\frac{1}{\Lambda^3})\right] \tag{12}$$

可见一阶项积分为 0, 二阶项积分得 $\frac{1}{4\Lambda^4}$，在 (Λ,∞) 的球壳上做积分可得:

$$4\pi\int_\Lambda^\infty \frac{1}{4\Lambda^4}\Lambda^2\ \mathrm{d}\Lambda \sim \frac{1}{\Lambda} \tag{13}$$

则对 10^{-5} 精度则要求

$$\epsilon \sim \frac{1}{\Lambda} \sim 10^{-5} \Rightarrow \Lambda \sim 10^5 \tag{14}$$

故截断需达到约 $\Lambda \sim 10^5$

5 4(c)

5.1 离散部分

第四题第三小问涉及较复杂的数学技巧，其实这个积分是冯老师在硕士期间与理论所刘川老师合作的一篇论文里的内容（感兴趣的同学见 (?) Appendix A，里面介绍了 $\mathcal{K}_2(t,r)$ 符号的含义）。这道题的用意是想让大家体验一下算法的威力，同时也是这门计算物理课里为数不多的和物理相关的东西了。

由于 $f(q)$ 的两项都是发散的，首先将待求 $f(q)$ 加入正规化子 $e^{i\vec{n}\cdot\vec{r}}$

$$f(q) = \sum_n \frac{e^{i\vec{n}\cdot\vec{r}}}{|\vec{n}|^2-q^2} - \mathrm{P.V.}\int \mathrm{d}^3n \frac{e^{i\vec{n}\cdot\vec{r}}}{|\vec{n}|^2-q^2} \tag{15}$$

首先你可能回问: 为什么冯老师能想到要在分子上加这一项呢? 事实上, 这是求解积分的一种常用技巧。$e^{i\vec{n}\cdot\vec{r}}$ 中的 $\vec{r}$ 叫做正规化子 (regulator), 在计算的结尾处要取 $r\to 0$。这一整套操作过程叫做正规化 (regularization), 其加入的目的就是为了将待求函数可能出现的发散变成有限的。常用的正规化子还有 $e^{-mr}, \frac{1}{k^2-\Lambda^2}, \nu^\epsilon$ 中的 m,Λ,ϵ。在最后我们取这些正规化子到极限 $r\to 0, m\to 0, \Lambda\to\infty, \epsilon\to 0$ 的时候积分结果将变成一个有限值。你可能想到了上一节 (3) 做主值积分的操作最后取 $\epsilon\to 0$，其实那里的 ϵ 也可以当做一个正规化子，可以看到在那里当我们取 $\epsilon\to 0$ 时结果的确是一个有限值。但是 ϵ 最终一定能消掉吗？当然不一定，对于一个本身发散的结果来说，通过正规化过程将得到 $f(q)+\frac{1}{\epsilon}$ 这样的项，$\epsilon\to 0$ 将得到正无穷。同样是上一节的积分中截断 Λ 事实上也是一个正规化子，可以看到 $\Lambda\to\infty$ 后结果的确是发散的。物理学上将这样的现象称为“紫外发散”（或红外发

散），这个发散在量子力学中无处不在，导致理论预言没法与实验进行对比。这个问题在上个世纪三四十年代由哥本哈根学派发现，困扰了一代物理学家，因为它几乎宣告了量子力学的死刑。但最终 Feynman,Schwinger, 朝永振一郎解决了这个问题，而解决紫外发散的第一步就是做正规化。

在我们的问题中，加入正规化子 $e^{i\vec{n}\cdot\vec{r}}$ 可以做傅里叶变换，我们不妨试一试，看能不能解决问题，如果不能，可以再尝试其他的正规化子。

$$\sum_n \frac{e^{i\vec{n}\cdot\vec{r}}}{|\vec{n}|^2-q^2} = \sum_n \frac{e^{i\vec{n}\cdot\vec{r}}e^{-(|\vec{n}|^2-q^2)}}{|\vec{n}|^2-q^2} + \sum_n \frac{e^{i\vec{n}\cdot\vec{r}}(1-e^{-(|\vec{n}|^2-q^2)})}{|\vec{n}|^2-q^2} \tag{16}$$

其中第二部分恰好可以化为 $[0,1]$ 上的定积分

$$\sum_n \frac{e^{i\vec{n}\cdot\vec{r}}(1-e^{-\vec{n}^2-q^2})}{|\vec{n}|^2-q^2} = \sum_n \int_0^1 \mathrm{d}t\ e^{i\vec{n}\cdot\vec{r}-t(|\vec{n}|^2-q^2)} \tag{17}$$

$$= \int_0^1 \mathrm{d}t\ \sum_n e^{i\vec{n}\cdot\vec{r}-t(|\vec{n}|^2-q^2)} \tag{18}$$

$$= \int_0^1 \mathrm{d}t\ \sum_n \hat{g}(\vec{n}) \tag{19}$$

定义

$$g(\vec{n}) := e^{i\vec{n}\cdot\vec{r}-t|\vec{n}|^2} \tag{20}$$

上式的被积函数可以用 Poisson 求和公式 $\sum_{n'}\hat{g}(\vec{n'}) = \sum_n g(\vec{n})$ 化简，这里把 $\vec{n}$ 看做位形格矢，$\vec{n'}$ 看做动量格矢。首先对 $\vec{n}$ 做傅里叶变换变到动量空间

$$\hat{g}(\vec{n'}) = \int \mathrm{d}^3n\ \hat{g}(\vec{n})e^{-i2\pi\vec{n}\cdot\vec{n'}} \tag{21}$$

$$= \int \mathrm{d}^3n\ e^{i\vec{n}\cdot(\vec{r}-2\pi\vec{n'})-t|\vec{n}|^2} \tag{22}$$

$$\to \int \mathrm{d}^3n\ e^{i\vec{n}\cdot\vec{r}-t|\vec{n}|^2} \tag{23}$$

方便起见将 $\vec{r}-2\pi\vec{n'}$ 直接记为 $\vec{r}$，到结尾处再恢复。然后将积分测度在球坐标中写出，并把 $\vec{r}$ 的方向设置为 z 轴

$$\hat{g}(\vec{n'}) = 2\pi\int_0^\infty n^2\mathrm{d}n \int_{-1}^1 \mathrm{dcos}\theta\ e^{inr\cos\theta}e^{-tn^2} \tag{24}$$

$$= 2\pi\int_0^\infty n^2\mathrm{d}n \frac{e^{inr}-e^{-inr}}{inr}e^{-tn^2} \tag{25}$$

通过变量代换 $n \to -n$ 可将两项之差化为一个积分并将积分限换为 $(-\infty \sim \infty)$，得到

$$\hat{g}(\vec{n'}) = \frac{-i2\pi}{r} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}n \; n e^{-tn^2+inr} \tag{26}$$

由此，积分化为了高斯积分，与热学中麦克斯韦速度分布律的积分是相同的，高斯积分是非常常见的一类积分，也是人们为数不多的可以精确求解的广义积分，可以通过查表获得答案，但是在这里我想介绍一个公式和一个技巧，这样大家再也不用惧怕这类积分。

首先指数前出现了一次积分变量 n，似乎不是我们通常见到的高斯积分 $\int \mathrm{d}x \; e^{-x^2}$，可以运用公式

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial ir} e^{-tn^2+inr} = n e^{-tn^2+inr}} \tag{27}$$

然后交换积分与偏导次序[1]

$$\int \mathrm{d}n \frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial r} \int \mathrm{d}n \tag{28}$$

从而将被积函数完全化为高斯积分。

$$\hat{g}(\vec{n'}) = -\frac{2\pi}{r} \frac{\partial}{\partial r} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}n \; e^{-tn^2+inr} \tag{29}$$

用这种偏微商的方法实际上可以计算任意 $x^m e^{-x^2}$ 形式的积分，所以很有用。

接下来使用一个建议大家记住的高斯积分公式

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; e^{-(ax^2+bx+c)} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2-4ac}{4a}}} \tag{30}$$

这个公式可通过配平方，换元，辅以 $\int \mathrm{d}x \; e^{-x^2} = \sqrt{\pi}$ 得到，它大大提高了我们进行复杂解析的自信心。由此，所有高斯型积分都可以通过公式 (3027) 得到解析结果。继续进行傅里叶变换

$$\hat{g}(\vec{n'}) = -\frac{2\pi}{r} \frac{\partial}{\partial r} \sqrt{\frac{\pi}{t}} e^{-\frac{r^2}{4t}} \tag{31}$$

[1] 有些同学可能会说，啊不行，微分与偏导不能这么随意交换的，数分里面有很多条件的，但是物理学家通常的想法是，即便逻辑上可能出现问题，但只要我的计算结果与实验数据一致，数学上就一定没有问题。考虑数学的严谨性是纯数学家干的事情，因为他们没有物理实验可以检验自己的正确性。

求偏微商并反代 $\vec{r}$ 的表达式可得

$$\hat{g}(\vec{n'})=(\frac{\pi}{t})^{\frac{3}{2}}e^{-\frac{(\vec{r}-2\pi\vec{n'})^2}{4t}} \tag{32}$$

由此我们将 (17) 式化为

$$\sum_n\frac{e^{i\vec{n}\cdot\vec{r}}(1-e^{-\vec{n}^2-q^2})}{|\vec{n}|^2-q^2}=\int_0^1\mathrm{d}t\ e^{tq^2}\sum_{n'}(\frac{\pi}{t})^{\frac{3}{2}}e^{-\frac{(\vec{r}-2\pi\vec{n'})^2}{4t}} \tag{33}$$

这个公式由于指数上出现 $e^{-\frac{(\vec{r}-2\pi\vec{n'})^2}{4t}}$，在数值求和过程中有指数压低，收敛速度将非常快，实验可知取 $1\sim 2$ 的截断即可得到理想的结果。

5.2 连续部分

接下来计算 $f(q)$ 中的连续积分

$$\mathrm{P.V.}\int\mathrm{d}^3n\frac{e^{i\vec{n}\cdot\vec{r}}}{|\vec{n}|^2-q^2} \tag{34}$$

采用 (24) 类似的技巧，可以将表达式化为

$$\mathrm{P.V.}\int\mathrm{d}^3n\frac{e^{i\vec{n}\cdot\vec{r}}}{|\vec{n}|^2-q^2}=-\frac{2\pi i}{r}\mathrm{P.V.}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}n\ \frac{ne^{inr}}{n^2-q^2} \tag{35}$$

这里积分取主值意味着积分变量 n 实际上取 $(-\infty,-q-\delta),(-q+\delta,q-\delta),(q+\delta,\infty)$ 三段。可以将被积函数延拓到复空间，构造一个不包含奇点的围道 (2)，这个围道由三部分组成，第一部分是大圆，由于在被积函数中有因子 e^{inr}，在大圆上 $e^{ir\times i\infty}$ 积分为零（也正是这个因子，我们“只能”选取上围道）第二部分是 $f(q)$ 中出现的在实轴上的主值积分，第三部分是两个小半圆 C_1,C_2。由于围道不包含奇点，此积分的值为零，因此只要我们把两个小半圆的结果通过留数定理得到，便可得到实轴上的主值积分。具体表达式为

$$(\int_{C_1}+\int_{C_2}+\int_{-\infty}^{-q-\delta}+\int_{-q+\delta}^{q-\delta}+\int_{q+\delta}^{\infty})\mathrm{d}n\ \frac{ne^{inr}}{n^2-q^2}=0 \tag{36}$$

原主值积分可化为

$$-\frac{2\pi i}{r}\mathrm{P.V.}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}n\ \frac{ne^{inr}}{n^2-q^2}=\frac{2\pi i}{r}(\int_{C_1}+\int_{C_2})\mathrm{d}n\ \frac{ne^{inr}}{n^2-q^2} \tag{37}$$

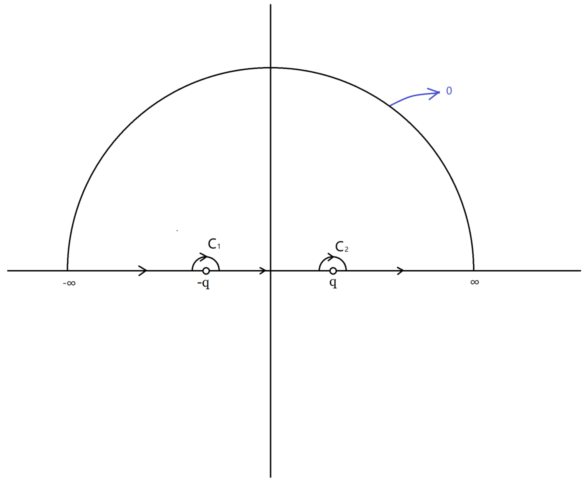

图 2: 选取一个不包含奇点的围道，其中实轴上的积分即我们要求的主值积分

C_1, C_2 的意义如图中所示，注意这里 C_1, C_2 取顺时针方向，而留数定理

$$2\pi i \mathrm{Res}[g(z), z_0] = \int_C g(z)\mathrm{d}z \tag{38}$$

中 C 约定取逆时针方向，二者差一个负号，同时，因为图中取的是半圆，要多一个 $\frac{1}{2}$ 因子

$$\frac{2\pi i}{r}(\int_{C_1} + \int_{C_2})\mathrm{d}n\ \frac{ne^{inr}}{n^2-q^2} = \frac{2\pi i}{r}(\frac{-2\pi i}{2})(\mathrm{Res}[\frac{ne^{inr}}{n^2-q^2}, -q] + \mathrm{Res}[\frac{ne^{inr}}{n^2-q^2}, q]) \tag{39}$$

$$= \frac{2\pi^2}{r}(\frac{e^{-iqr}}{2} + \frac{e^{iqr}}{2}) \tag{40}$$

$$= \frac{2\pi^2 \cos(qr)}{r} \tag{41}$$

由于结果最后要取正规化子 $r \to 0$，表达式高阶项将对结果无贡献，只保留 r 最高阶可得

$$\frac{2\pi^2\cos(qr)}{r} = \frac{2\pi^2}{r} + \mathcal{O}(r) = \int_0^\infty \mathrm{d}t\ (\frac{\pi}{t})^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r^2}{4t}} + \mathcal{O}(r) \tag{42}$$

最后一个等号可以通过变量代换 $t \to \frac{1}{t}$ 化为 Gamma 函数 $\Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}$ 得到证明。

5.3 $f(q)$

结合上两小节的内容，可以得到待求函数 $f(q)$ 的表达式

$$f(q) = \sum_n \frac{e^{i\vec{n}\cdot\vec{r}} e^{-(|\vec{n}|^2-q^2)}}{|\vec{n}|^2-q^2} + \int_0^1 \mathrm{d}t\ e^{tq^2}(\frac{\pi}{t})^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{(\vec{r}-2\pi\vec{n})^2}{4t}} - \int_0^\infty \mathrm{d}t\ (\frac{\pi}{t})^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r^2}{4t}} \tag{43}$$

取 $r \to 0$，将最后一项拆成两个积分 $(0,1)$ 与 $(1,\infty)$，并将 $(0,1)$ 的部分乘以因子 $(1 - e^{tq^2} + e^{tq^2})$ 即得最终结果

$$f(q) = \sum_{n} \frac{e^{-(|\vec{n}|^2 - q^2)}}{|\vec{n}|^2 - q^2} + \int_0^1 \mathrm{d}t\ e^{tq^2} (\frac{\pi}{t})^{\frac{3}{2}} \sum_{n' \neq \vec{0}} e^{-\frac{\pi^2 |\vec{n'}|^2}{t}} + \int_0^1 \mathrm{d}t\ (\frac{\pi}{t})^{\frac{3}{2}} (e^{tq^2} - 1) - \int_1^{\infty} \mathrm{d}t\ (\frac{\pi}{t})^{\frac{3}{2}} \quad (44)$$

四项中，第一部分通过数值求和得到，值为 6.1593613(这一项需要的截断为 $4 \sim 5$ 即可达到 10^{-5} 精度要求)，第二部分也通过数值得到 0.0002649，第三部分通过直接求积分得到 6.0832468, 第四部分解析得到为 $-2\pi^{\frac{3}{2}} = -11.136656$，最后得到结果为 $f(q) = 1.1062170$