五、题目

1. **基本数值技巧，本题目的是希望大家可以简单的程序解决各种具体问题** (35 分)

   1. 对下面的函数做逼近（$x \geq 0$）

$$\text{erf}(x) \simeq 1 - \exp(-ax - bx^2).$$

   误差越小越好（此值非唯一）$a =$______________，$b =$______________。此时

$$I = \int_0^\infty |\text{erf}(x) - 1 + \exp(-ax - bx^2)|^2 dx = (\qquad\qquad).$$

   2. 下面的表达式（$2 > a > 0, n$ 足够大）的近似表达式

$$I = \sum_{k=0}^{n} \frac{n^{ak}}{k!(k+n)!} \simeq \underline{\qquad\qquad\qquad}$$

   3. 物理中经常需要根据数值结果猜表达式系数，比如 0.706 $\to \sqrt{2}/2$。请猜下面的数对应的表达式：0.5642 $\to$ ______________ , 0.636 $\to$ ______________ , 1.772 $\to$ ______________ .

   4. 在 0 到 200 内找方程整数解（$0 \leq x \leq y \leq z \leq w$）。提示：注意精度转换导致的误差。

$$x^5 + y^5 + z^5 + w^5 = k^5.$$

$$(x, y, z, w, k) = \underline{\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad}.$$

2. 我们经常需要对复杂的表达式做极限分析，并猜测结果。设（$0 < \beta < 1$）

$$c_{\text{eff}}(\beta) = \frac{12}{\pi^2} \int_\beta^1 \gamma(\lambda) \frac{\lambda}{1-\lambda^2} \frac{\sqrt{1-\beta^2}}{\sqrt{\lambda^2-\beta^2}} d\lambda.$$

   其中 $\gamma(\lambda) = -\frac{1+\lambda}{2}\ln(\frac{1+\lambda}{2}) - \frac{1-\lambda}{2}\ln(\frac{1-\lambda}{2})$。数值分析这个函数，给出近似表达式

   (a) $\beta \to 0$，$c_{\text{eff}} =$ ______________________________ .

   (b) $\beta \to 1$，$c_{\text{eff}} =$ ______________________________ .

   (c) 猜在整个区间的近似表达式 $c_{\text{eff}} =$ ______________________________ .

3. **利用 MC 方法求解下面的高维积分**

$$I_1 = \int_{x_1^2+x_2^2+x_3^2+x_4^2+x_5^2<2} dx_1 dx_2 dx_3 dx_4 dx_5 \sin[2\pi(x_1+5x_2+10x_3+15x_4+20x_5)].$$

$$I_2 = \left(\prod_{i=1}^{10} \int_{\sum_i x_i^2<3} \frac{dx_i}{\sqrt{2\pi}} \mathrm{e}^{-\frac{x_i^2}{2}}\right) \mathrm{e}^{\sin(x_1^2+x_2^2+x_3^2+x_4^2+x_5^2)+\cos(x_5^2+x_6^2+x_7^2+x_8^2+x_9^2+x_{10}^2)}.$$

$$I_3 = \prod_{i=1}^{10} \left(\int_{\sum_i x_i^2<3} dx_i\right) \frac{1}{\sum_i^{10} x_i^4 + \prod_i^{10} \cos(x_i)^2}.$$

请写出 $I_1 =$ ______________,$I_2 =$ ______________,$I_3 =$ ______________。

4. 在非线性物理中，经常需要求解一些孤立子问题。考虑下面的方程

$$u_{tt} - u_{xx} = U\sin(u), \quad u = u(t,x).$$

利用下列方程的解 $u''(x) = \sin(u)$ 为 $u = 4\mathrm{arcTan}(e^{\pm x})$。请回答下面的问题

(a) 这个方程有平面解，请给出一般形式

$$u(x,t) = u(x - vt) = \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_} .$$

(b) 这个模型对应一个哈密顿方程，请确定这个哈密顿的具体形式

$$H = \text{\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_} .$$

(c) 能量 E 存在最小值，请计算其能量最小值对应的 $v_0 =$ ______________ .

(d) 在 v_0 附近 $E(v) = E(v_0) + \frac{1}{2}m(v - v_0)^2$, 计算孤立子的质量 $m =$ ______________ 。

5. **固体物理的 Bloch 能带问题**

考虑二维周期势 $U(x,y) = U(\cos(x) + \cos(y) + 0.2\cos(x+y))$, 假设粒子质量 $m = 1$, Planck 常数 $\hbar = 1$。计算这个模型的 Bloch 能带的能量 $E_n(\mathbf{k})$，$n = 1, 2, \cdots$，且按递增顺序排列。

(a) $\mathbf{k} = (0.0, 0.0), U = 1.0, E_1, E_2, E_3, E_4, E_5 =$ ______________________________ .

(b) $\mathbf{k} = (0.3, 0.5), U = 2.0, E_1, E_2, E_3, E_4, E_5 =$ ______________________________ .

(c) $\mathbf{k} = (1.0, 1.4), U = 10.0, E_1, E_2, E_3, E_4, E_5 =$ ______________________________ .

6. **随机矩阵**

考虑如下的分块随机矩阵

$$H = (1-k)H_0 + k\begin{pmatrix} 0_{nn} & T_{nn} \\ T_{nn}^\dagger & 0_{nn} \end{pmatrix}.$$

H_0 是 $2n \times 2n$ 的对角随机矩阵，其元素是独立同分布的，满足均匀分布 $U(-2,2)$。矩阵 T_{nn} 是 $n \times n$ 的随机矩阵，各元素满足正态分布 $N(0,1)$。若其能谱为 E_j，其中 $E_j \leq E_{j+1}$ 按递增顺序排列。定义能级间距比和平均值

$$r_j = \frac{\min(d_j, d_{j+1})}{\max(d_j, d_{j+1})}, \quad \bar{r} = \left\langle \sum_j \frac{r_j}{2n-2} \right\rangle.$$

这里 $d_{j+1} = E_{j+1} - E_j$。设 $n = 200$，做平均至少 1000 次，请计算

(a) $k = 0.01, \bar{r} \simeq$ ______________,

(b) $k = 0.2, \bar{r} \simeq$ ______________,

(c) $k = 0.6, \bar{r} \simeq$ ______________.

7. **精确对角化**

二维横场 Ising 模型的哈密顿量

$$\hat{H} = \sum_{\langle m,n \rangle} -J\hat{\sigma}_m^x \hat{\sigma}_n^x - h\sum_m \hat{\sigma}_m^z,$$

其中 $\hat{\sigma}^x, \hat{\sigma}^z$ 是泡利算符。利用精确对角化（ED）方法计算其 $L_x = 3,\ L_y = 2$ 方格子上 (如图2) 的本征态和本征值，并回答:

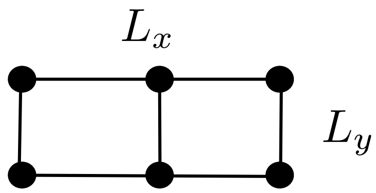

图 2　二维正方晶格

(a) 该系统的 Hilbert 空间维数 $D =$ ______________

(b) $J = 1, h = 0.1$ 时最低的四个本征态的能量 $E_1 =$ ______________ ,$E_2 =$ ______________ ,$E_3 =$ ______________ 。(精确到小数点后 6 位)

(c) $J = 1, h = 0.1$ 时基态 $|g\rangle$ 的关联函数 $\mathcal{K} = \frac{1}{L_x L_y} \langle g| \sum_i \sigma_0^x \sigma_i^x |g\rangle =$ ______________。(精确到小数点后 4 位)

8. **BdG 变换**

具有次近邻跃迁的有 p-wave 配对的广义 Aubry-André 模型如下

$$\hat{H} = \sum_m \left(a_m^\dagger a_{m+1} + t_1 a_m^\dagger a_{m+2} + \Delta a_m a_{m+1} + \text{h.c}\right) + 2V \sum_m \frac{\cos(2\pi bm)}{1 - \alpha\cos(2\pi bm)} a_m^\dagger a_m,$$

其中 $b = \frac{\sqrt{5}-1}{2}$，$t_1 = 0.1, \Delta = 2$，$\alpha = 0.5$。定义物理量 NPR (Normalized Participation

Ratio), 其表达式如下

$$\mathrm{NPR}_n = \frac{1}{2L\sum_m (|\psi_n|^4)}.$$

在开边界条件下，$L = 1000$，$V = 1.1$，计算本征态和本征能量（能量递增顺序排列），请精确到小数点后 3 位。

(a) $E_1 =$ ______________, $\mathrm{NPR}_1 =$ ______________;

(b) $E_{111} =$ ______________, $\mathrm{NPR}_{111} =$ ______________ ;

(c) $E_{222} =$ ______________, $\mathrm{NPR}_{222} =$ ______________ ;

(d) $E_{333} =$ ______________, $\mathrm{NPR}_{333} =$ ______________ ;

9. **经典 Ising 模型的模拟**

二维方格子上的具有次紧邻耦合的经典 Ising 模型的哈密顿量可以写成

$$H = -J\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j - J_1\sum_{\langle\langle i,j\rangle\rangle}\sigma_i\sigma_j - h\sum_i \sigma_i,$$

其中 $\langle\cdot\rangle$ 表示最近邻耦合, $\langle\langle\cdot\rangle\rangle$ 表示次近邻耦合（比如 (i,j) 和 $(i\pm1, j\pm1)$ 为次近邻）。利用 MC 方法在周期边界条件下计算如下物理量：

(a) $J = 1, J_1 = 0.1, h = 0.5$, 温度 $T = 0.1$ 时的单格点能量 $E/N =$ ______________, 平均磁化强度 $m = \frac{\sum_m \sigma_m}{N} =$ ______________, 热容 $C_v =$ ______________，磁化率 $\chi =$ ______________。(答案精确到相对误差百分之一)

(b) 请估计 $J = 1, J_1 = 0.1, h = 0.5$ 时，系统的相变温度 $T_c =$ ______________。

10. **经典力学中的周期运动**

(a) 考虑下面的运动方程

$$\ddot{x} + \mu\dot{x} + x = 0, \quad x(0) = a, \dot{x} = b.$$

取运动方程可以近似为 $x(t) \simeq A\cos(\omega t + \theta)$。求 $a = 0.4$, $b = 0$, $\mu = 10$ 时 $\omega =$ ______________.

(b) H 原子被吸附在一个金属表面，其势满足

$$U(r) = D_e(1 - \exp(-\alpha(r - r_0)))^2 - D_e.$$

氢原子质量 $m = 1.66 \cdot 10^{-24}$ g, $D_e = 1$ eV, $\alpha = 0.5$, $r_0 = 1.5$, Planck 常数 $h = 6.626 \cdot 10^{-34}$ J$\cdot s$，$hc = 1.24$ eV$\cdot\mu$m，$m_e c^2 = 0.511$ MeV（c 为光速）。计算振动频率（假设只有 r 方向的运动）$\omega =$ ______________ 和波长 $\lambda =$ ______________。

11. **随机微分方程**

假设一个股票的价格 S 服从下面的离散方程（注：本题的 S 换成位置则对应物理中的随机扩散问题）

$$S_{i+1} = S_i + rS_i + S_i\eta_i,$$

其中 $r = 5\%/365$ 为天收益, $\eta_i \sim N(0, \sigma)$ 为正态分布，它表示市场的随机起伏。回答

(a) 一年后，假设投资者还有收益（S_{365} 的平均值 $> S_1$），问 $\sigma <$ ______________.

(b) 二年后，假设投资者还有收益（$S_{2\times 365}$ 的平均值 $> S_1$），问 $\sigma <$ ______________.