## homework1

#### 2000011476 胡逸

2022年10月8日

# tips for reading:

- 1. 由于此 pdf 是由文件夹中的hw1.ipynb直接导出,可能直接阅读.ipynb 文件会更加方便流畅,程序也可直接在其中编译运行。
- 2. 本文件夹包含了主要包含了一个.ipynb 文件与一个.cpp 文件。其中.ipynb 文件的编译方式是,在 vscode 中下载 Jupyter 插件,选择 python 环境即可进行编译,或者直接使用 jupyter notebook 软件进行打开; cpp 文件的编译方式即为一般的 c++ 文件的编译方式。

# 1 $e^{-x}$ 展开

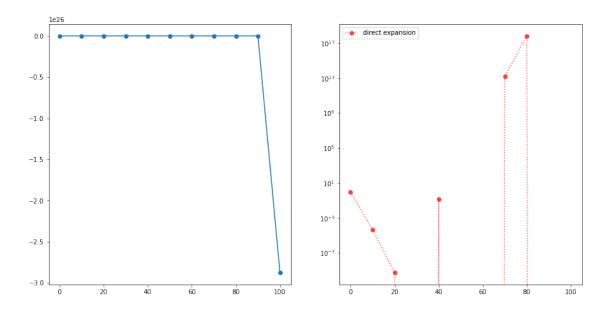
### 1.1 直接展开法

```
[48]: def fac(n:int):
    '''return factorial(n) '''
    result = 1
    if n != 0:
        for i in range(1, n + 1):
            result = result * i
        return result

def expansion(x):
    '''return exp(-x), using direct expansion'''
    n = 0
    sum = 0
    while True:
        sum += ((-1) ** n) * (x ** n / fac(n))
        if sum + ((-1) ** n) * (x ** n / fac(n)) == sum : break
```

```
n += 1
return sum
```

```
[49]: from cmath import log
      import matplotlib.pyplot as plt
      import numpy as np
      import time
      x = []
      y_1 = []
      y_log = []
      for i in range(0, 110, 10):
          x.append(i)
          y_1.append(expansion(i))
      plt.figure(figsize=(15, 7.5))
      plt.subplot(121)
      plt.scatter(x, y_1)
      plt.plot(x,y_1)
      plt.subplot(122)
      plt.semilogy(x,
                   y_1,
                   linewidth=1.5,
                   color='red',
                   linestyle='dotted',
                   label='direct expansion',
                   alpha=0.7,
                   marker='o')
      plt.legend()
      plt.show()
```



上图左图是由直接展开法得到的结果  $e^{-x}$ ,右图是将 y 取了对数坐标后得到的  $\log(e^{-x})$ 。需要说明的是,此算法在  $x \geq 30$  时,得到的结果  $e^{-x}$  可能为负数,无法转化为对数,所以右图中会有一些点缺失(具体为 x=30,50,60,90,100 时)。

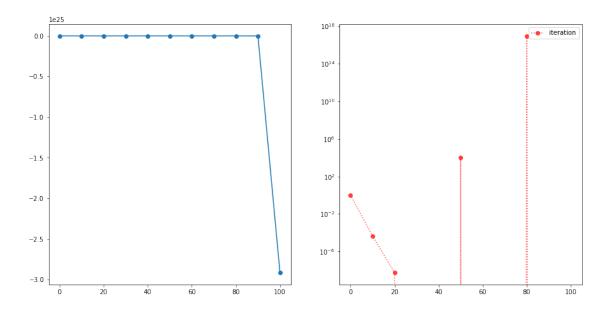
观察上图可以发现,直接展开法在  $x \ge 30$  时有较为明显的误差。

## 1.2 递归法

```
[50]: def s(n,x):
    if n == 0: return 1
        else: return - s(n - 1, x) * x / n

def iteration(x):
    '''return exp(-x), using iteration'''
    sum = 0
    n = 0
    while True:
        sum += s(n, x)
        n += 1
        if sum + s(n, x) == sum: break
    return sum
```

```
[51]: from cmath import log
      import math
      import matplotlib.pyplot as plt
      import numpy as np
      import time
      x = []
      y_2 = []
      for i in range(0, 110, 10):
          x.append(i)
          y_2.append(iteration(i))
      plt.figure(figsize=(15, 7.5))
      plt.subplot(121)
      plt.scatter(x, y_2)
      plt.plot(x, y_2)
      plt.subplot(122)
      plt.semilogy(x,
                   y_2,
                   linewidth=1.5,
                   color='red',
                   linestyle='dotted',
                   label='iteration',
                   alpha=0.7,
                   marker='o')
      plt.legend()
      plt.show()
```



上图左图是由递归法得到的结果  $e^{-x}$ ,右图是将 y 取了对数坐标后得到的  $\log(e^{-x})$ 。与第一问一样,此算法在  $x \ge 30$  时,得到的结果  $e^{-x}$  可能为负数,无法转化为对数,所以右图中会有一些点缺失(具体为 x = 30, 40, 60, 70, 90, 100 时)。

观察上图可以发现,直接展开法在  $x \ge 30$  时有较为明显的误差。

理论上,递归法的时间复杂度要低于直接展开法。

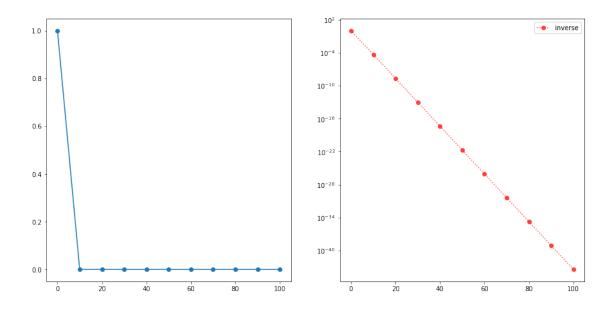
## 1.3 先利用 1.2 计算 $e^x$ , 然后求倒数

```
[52]: def s(n, x):
    if n == 0: return 1
        else: return s(n - 1, x) * x / n

def iteration_positive(x):
    '''return exp(x), using iteration'''
    sum = 0
    n = 0
    while True:
        sum += s(n, x)
        n += 1
        if s(n, x) == 0: break
```

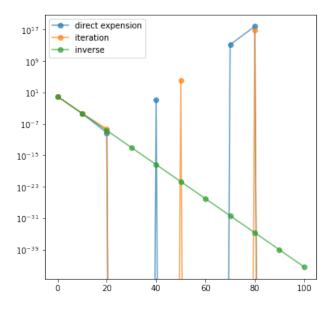
return sum

```
[53]: from cmath import log
      import matplotlib.pyplot as plt
      import numpy as np
      x = []
      y_3 = []
      for i in range(0, 110, 10):
          x.append(i)
          y_3.append(1/iteration_positive(i))
      end = time.time()
      plt.figure(figsize=(15, 7.5))
      plt.subplot(121)
      plt.scatter(x, y_3)
      plt.plot(x, y_3)
      plt.subplot(122)
      plt.semilogy(x,
                   y_3,
                   linewidth=1.5,
                   color='red',
                   linestyle='dotted',
                   label='inverse',
                   alpha=0.7,
                   marker='o')
      plt.legend()
      plt.show()
```



上图左图为运用方法 3 得到的结果  $e^{-x}$ ,右图是将 y 取了对数坐标后得到的  $\log(e^{-x})$ 。可以发现这种方法在 x 较大时精度明显提高,而且时间复杂度也与递归法相近。

下面是三种方法求得的  $e^{-x}$  通过 y 对数坐标作出的图,可以明显看到方法 (3) 在精度上的优势。



# 2 矩阵的模和条件数

# 2.1 计算 A 的行列式

上三角矩阵的行列式等于对角元的乘积,因而 A 的行列式显然是 1,所以不是奇异矩阵。

## 2.2 给出 A 的逆

```
[55]: import numpy as np
      def get_A(n):
          111
          return matix A of n dim
          input: n
          output: A of n dim
          A = np.zeros((n,n))
          for i in range(n):
              A[i, i]=1
              for j in range(i+1,n):
                  A[i, j] = -1
          return A
      def get_I(n:int):
          111
          input: n
          output: I of n dim
          I = np.zeros((n,n))
          for i in range(n):
              I[i, i]=1
          return I
      def get_inverse(A):
          111
          input: A
          output: A^{-1}
          111
```

```
n = len(A)
big_matrix = np.concatenate((A,get_I(n)), axis=1) # 得到和 I 拼起来的大矩阵
for i in range(n - 1, -1, -1):
    for j in range(n - 1, i, -1):
        big_matrix[i] += big_matrix[j]
    return big_matrix[:, -n:]

# evaluate
print(get_inverse(get_A(5)))
print(get_inverse(get_A(5))) @ get_A(5))
```

[[1. 1. 2. 4. 8.]

[0. 1. 1. 2. 4.]

[0. 0. 1. 1. 2.]

[0. 0. 0. 1. 1.]

[0. 0. 0. 0. 1.]]

[[1. 0. 0. 0. 0.]

[0. 1. 0. 0. 0.]

[0. 0. 1. 0. 0.]

[0. 0. 0. 1. 0.]

[0. 0. 0. 0. 1.]]

上述程序给出了 n=5 时,  $A^{-1}$  的形式, 可以看出:

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 & 4 & \dots & 2^{n-2} \\ 0 & 1 & 1 & 2 & \dots & 2^{n-3} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 2 & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \end{bmatrix}$$
 (1)

2.3 证明: $||A||_{\infty} = \max_{i} \sum_{j} |a_{ij}|$ 

$$||x||_{\infty} = \max_{i} |x_{i}|$$

$$||Ax||_{\infty} = \max_{i} |\sum_{j} a_{ij}x_{j}|$$

$$||A||_{\infty} = \sup_{x \neq 0} \frac{\max_{i} |\sum_{j} a_{ij}x_{j}|}{\max_{i} |x_{i}|}$$

$$= \max_{i} \sum_{j} |a_{ij}|$$

$$(2)$$

等式最后一行需要: 取 x 使得  $a_{ij}x_j$  对任意 j 同号,且  $|x_j|$  相等。

#### 2.4 证明

1.  $||U||_2 = ||U^{\dagger}||_2 = 1$ 

$$||U||_2 = ||U^{\dagger}||_2 = \left[\rho(U^{\dagger}U)\right]^{\frac{1}{2}} = \left[\rho(I)\right]^{\frac{1}{2}} = 1 \tag{3}$$

2. 对任意 A,  $||UA||_2 = ||A||_2$ 

$$||UA||_2 = \left[\rho((UA)^{\dagger}UA)\right]^{\frac{1}{2}} = \left[\rho(A^{\dagger}U^{\dagger}UA)\right]^{\frac{1}{2}} = \left[\rho(A^{\dagger}A)\right]^{\frac{1}{2}} = ||A||_2 \tag{4}$$

## 2.5 计算条件数

$$||A||_{\infty} = n$$

$$||A^{-1}||_{\infty} = 1 + 1 + 2 + 4 + \dots + 2^{n-2} = 2^{n-1}$$

$$\therefore K_{\infty}(A) = ||A||_{\infty} ||A^{-1}||_{\infty} = n \cdot 2^{n-1}$$

# 3 Hilbert 矩阵

#### 3.1

要使 D 取极小值,说明:

$$\frac{\partial D}{\partial c_i} = 0 \tag{5}$$

同时根据 D 的表达式:

$$\frac{\partial D}{\partial c_j} = \int_0^1 dx \left( \sum_i c_i x^{i-1} - f(x) \right)^2 
= \int_0^1 2 dx \left( \sum_i c_i x^{i-1} - f(x) \right) x^{j-1} 
= 2 \sum_i c_i \int_0^1 x^{i+j-2} dx - 2 \int_0^1 f(x) x^{j-1} dx 
= 2 \sum_i c_i \frac{1}{i+j-1} - 2 \int_0^1 f(x) x^{j-1} dx$$
(6)

所以有,(这里更换了一下 i 和 j 的符号,并不影响结果)

$$\sum_{j} c_{j} \frac{1}{i+j-1} = \int_{0}^{1} f(x)x^{i-1} dx$$

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

$$\sum_{j} (H_n)_{ij} c_j = b_i$$

## 3.2 说明 $H_n$ 是对称的正定矩阵,进而论证它非奇异。

$$c^{T}Hc = \sum_{i,j} H_{ij}x_{i}x_{j}$$

$$= \sum_{i,j} \frac{1}{i+j-1}x_{i}x_{j}$$

$$= \int_{0}^{1} \sum_{i,j} x_{i}x_{j}t^{i+j-2}dt$$

$$= \int_{0}^{1} \sum_{i,j} (x_{i}t^{i-1})(x_{j}t^{j-1})dt$$

$$= \int_{0}^{1} (\sum_{i} x_{i}t^{i-1})^{2}dt \ge 0$$
(7)

所以  $H_n$  为对称的正定矩阵,根据正定矩阵行列式为正,可知  $H_n$  非奇异。

```
for i in range(n):
    for j in range(n):
        H[i][j] = 1 / (i + j + 1)
return H
```

#### 3.3 估计 $det(H_n)$ 的值

#### s1. 直接通过严格表达式计算

#### s2. 通过对严格表达式取对数降低复杂度

对  $det(H_n)$  取对数:

$$\log(\det(H_n)) = 4\log(c_n) - \log(c_{2n})$$

```
\log(c_n) = \log 1 + (\log 1 + \log 2) + (\log 1 + \log 2 + \log 3) + \dots + (\log 1 + \dots \log(n-1))= (n-1)\log 1 + (n-2)\log 2 + \dots + (n-(n-1))\log(n-1)
```

```
[58]: # 通过取对数求 det(Hn)

def log_c(n):
    result = 0
    for i in range(1,n): result += (n-i) * np.log10(i)
    return result

def log_det_H(n):
    return 4 * log_c(n) - log_c(2 * n)

def get_from_log_det_H(n):
    return 10 ** log_det_H(n)

for i in range(1,11):
    print('when n = ', i ,', det(Hn) = ',get_from_log_det_H(i))
```

#### s3. 对对数式进行估计以降低复杂度

$$\ln(c_n) = \ln 1 + (\ln 1 + \ln 2) + \dots + (\ln 1 + \dots \ln(n-1))$$

$$= \sum_{i=1}^{n-1} (n-i) \ln i$$

$$\approx \int_{1}^{n} (n-x) \ln x dx$$

$$= (n(x \ln x - x) - (\frac{x^2}{2} \ln x - \frac{x^2}{4})) \Big|_{1}^{n}$$

$$= n^2 \ln n - n^2 - \frac{n^2}{2} \ln n + \frac{n^2}{4} - (-n + \frac{1}{4})$$

$$= \frac{n^2}{2} \ln n - \frac{3n^2}{4} - (-n + \frac{1}{4})$$
(8)

$$\ln(\det(H_n)) = 4\ln(c_n) - \ln(c_{2n})$$

$$= 4\left[\frac{n^2}{2}\ln n - \frac{3n^2}{4} - (-n + \frac{1}{4})\right] - \left[2n^2\ln 2n - 3n^2 - (-2n + \frac{1}{4})\right]$$

$$= -2n^2\ln 2 + 2n$$
(9)

#### 结果如下:

```
when n = 1 , \det(\mathrm{Hn}) = 1.8472640247326626

when n = 2 , \det(\mathrm{Hn}) = 0.21327402356696973

when n = 3 , \det(\mathrm{Hn}) = 0.0015389587154111299

when n = 4 , \det(\mathrm{Hn}) = 6.940583668280697e-07

when n = 5 , \det(\mathrm{Hn}) = 1.9563431581210277e-11

when n = 6 , \det(\mathrm{Hn}) = 3.446466766384948e-17

when n = 7 , \det(\mathrm{Hn}) = 3.794750016915579e-24

when n = 8 , \det(\mathrm{Hn}) = 2.611393179409883e-32

when n = 9 , \det(\mathrm{Hn}) = 1.12315934960641e-41

when n = 10 , \det(\mathrm{Hn}) = 3.019190423321601e-52
```

#### 3.4 比较 GEM 和 Cholesky 分解求解线性方程 $H_n \cdot x = b$

```
for j in range(n):
    H[i][j] = 1 / (i + j + 1)
return H
```

```
[60]: def GEM(H):
         return solution x of H * x = b through Gauss Elimination Method
         111
         # 通过初等变换将矩阵化为上三角矩阵
         n = len(H)
         # 此后的 H 均指增广矩阵
         H = np.concatenate((H, np.ones((n, 1))), axis=1)
         for i in range(n):
             if i == 0: H[i] = H[i] / H[i, i]
             else:
                assert H[i - 1, i - 1] == 1
                for j in range(i):
                    H[i] = H[i] - H[j] * H[i, j]
                    H[i] = H[i] / H[i, i]
         # 将上三角增广矩阵通过初等变换转化为对角矩阵
         for i in range(n - 2, -1, -1):
             for j in range(n - 1, i, -1):
                H[i] = H[i] - H[j] * H[i, j]
         return H[:, n]
```

```
H[i-1, j-1] = H[i-1, k-1] * H[j-1, k-1]
           H[i-1, j-1] = H[i-1, j-1] / H[j-1, j-1]
   for i in range(n):
       for j in range(i + 1, n):
           H[i, j] = 0
   # 此时 H 是一个下三角矩阵
   L = H
   # Rightarrow L y = b
   L = np.concatenate((H, np.ones((n, 1))), axis=1)
   for i in range(n):
       if i == 0: L[i] = L[i] / L[i, i]
       else:
           assert L[i - 1, i - 1] == 1
           for j in range(i):
               L[i] = L[i] - L[j] * L[i, j]
               L[i] = L[i] / L[i, i]
   y = L[:, n]
   # 下面求 H.Tx = y
   Lt = H.T
   Lt = np.concatenate((Lt, np.ones((n, 1))), axis=1)
   for i in range(n):
       Lt[i][n] = y[i]
   for i in range(n):
       Lt[i] = Lt[i] / Lt[i, i]
   for i in range(n - 2, -1, -1):
       for j in range(n - 1, i, -1):
           Lt[i] = Lt[i] - Lt[j] * Lt[i, j]
   return Lt[:, n]
for i in range(1, 11):
   H = Hilbert(i)
   print('n = ', i)
```

```
print('GEM :', GEM(H))
    print('Cho :', Cholesky(H))
n = 1
GEM : [1.]
Cho : [1.]
n = 2
GEM : [-2. 6.]
Cho: [-2. 6.]
n = 3
GEM: [ 3. -24. 30.]
Cho: [ 3. -24. 30.]
n = 4
GEM: [ -4. 60. -180. 140.]
Cho: [ -4. 60. -180. 140.]
n = 5
GEM : [
         5. -120. 630. -1120. 630.]
         5. -120. 630. -1120.
Cho : [
                                   630.1
n = 6
GEM: [-6.000e+00 2.100e+02 -1.680e+03 5.040e+03 -6.300e+03 2.772e+03]
Cho: [-6.000e+00 2.100e+02 -1.680e+03 5.040e+03 -6.300e+03 2.772e+03]
n = 7
GEM: [7.00000003e+00 -3.36000001e+02 3.78000001e+03 -1.68000000e+04
  3.46500001e+04 -3.32640001e+04 1.20120000e+04]
Cho: [7.00000004e+00 -3.36000002e+02 3.78000002e+03 -1.68000001e+04
  3.46500001e+04 -3.32640001e+04 1.20120000e+04]
n = 8
GEM: [-7.99999961e+00 5.03999976e+02 -7.55999966e+03 4.61999980e+04
-1.38599994e+05 2.16215992e+05 -1.68167994e+05 5.14799982e+04]
Cho: [-7.99999983e+00 5.03999988e+02 -7.55999982e+03 4.61999989e+04
-1.38599997e+05 2.16215995e+05 -1.68167997e+05 5.14799990e+04]
n = 9
GEM : [ 8.99993240e+00 -7.19995227e+02 1.38599178e+04 -1.10879406e+05
  4.50447797e+05 -1.00900346e+06 1.26125475e+06 -8.23676812e+05
 2.18789208e+05]
Cho: [8.99993937e+00 -7.19995739e+02 1.38599269e+04 -1.10879473e+05
  4.50448049e+05 -1.00900399e+06 1.26125537e+06 -8.23677188e+05
```

2.18789302e+05]

n = 10

GEM: [-9.99748263e+00 9.89781815e+02 -2.37553432e+04 2.40197605e+05

-1.26105758e+06 3.78322315e+06 -6.72580589e+06 7.00039627e+06

-3.93775591e+06 9.23677917e+05]

Cho: [-9.99766824e+00 9.89798372e+02 -2.37557034e+04 2.40200929e+05

-1.26107361e+06 3.78326758e+06 -6.72587926e+06 7.00046754e+06

-3.93779349e+06 9.23686209e+05]

可以看出, GEM 算法与 Cholesky 算法在 n 较小时,给出的解一致,在 n 较大时,给出的解有些许偏差。我认为 Cholesky 算法精度更高,因为 Cholesky 分解对正定的厄米矩阵稳定性极佳。

## 4 级数求和与截断误差

**4.0.1** 请求出  $f(q^2)$  在  $q^2 = 0.5$  处的值

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

其中积分可以写出解析表达式,

$$\int d^{3}\vec{n} \frac{1}{|\vec{n}|^{2} - q^{2}} = \int 4\pi r^{2} dr \frac{1}{r^{2} - q^{2}}$$

$$= 4\pi \int (1 + \frac{q^{2}}{r^{2} - q^{2}}) dr$$

$$= 4\pi r + 4\pi q \int \frac{1}{(\frac{r}{q})^{2} - 1} d(\frac{r}{q})$$

$$= \begin{cases} 4\pi r - 4\pi q \cdot \tanh^{-1}(\frac{r}{q}) & r < q \\ 4\pi r - 4\pi q \cdot \tanh^{-1}(\frac{q}{r}) & r \ge q \end{cases}$$
(11)

因而:

$$f(q^{2}) = \sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^{3}} \frac{1}{|\vec{n}|^{2} - q^{2}} - 4\pi(\Lambda - q \cdot \tanh^{-1}(\frac{q}{\Lambda}))$$

下面用 python 和 c++ 编写程序来计算上式。

[62]: # python version

from cmath import tanh

import math

import numpy as np

from tqdm import tqdm

```
r = 100
q2 = 0.5
q = q2**(0.5)
sum = 0

for x in tqdm(range(-r, r + 1)):
    ylim = int((r**2 - x**2)**(0.5))
    for y in range(-ylim, ylim + 1):
        zlim = int((r**2 - x**2 - y**2)**(0.5))
        for z in range(-zlim, zlim + 1):
            sum += 1 / (x**2 + y**2 + z**2 - q2)

print('series = ', sum)

inter = 4 * math.pi * (r - q * np.arctanh(q / r))

print('integral = ', inter)
print(sum - inter)
```

100% | 201/201 [00:05<00:00, 37.71it/s]

series = 1257.5870842531626

integral = 1256.5742285356166

1.0128557175460173

由于 python 运行速度较慢,改用 c++ 编写程序,程序放在q4.cpp。 c++ 的运行到  $\Lambda=1000$  的结果为,f=1.09745。 所以,估计结果约为 1.1。

# 4.1 引入 $\Lambda$ 需要多大可以使 f 精度达到 $10^{-5}$ ?

大约需要  $\Lambda$  达到  $10^5$  数量级。

#### 4.2

我们可以发现,原先主要的计算复杂度源于我们试图对三维矢量  $\vec{n}$  求和,可以将其转化为对  $|\vec{n}|^2$  求和,即

$$\sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^3} \frac{1}{|\vec{n}|^2 - q^2} = \sum_{r^2 < \Lambda^2} \frac{c(r^2)}{r^2 - q^2} \stackrel{r^2 \triangleq \gamma}{=} \sum_{\gamma < \Lambda^2} \frac{c'(\gamma)}{\gamma - q^2}$$

要计算右式,计算复杂度主要在于对于每一个  $\gamma$ ,如何计算其系数  $c'(\gamma).c'(\gamma)$  代表着  $\gamma$  有多少种分解方式可以分解成三个有序整数的平方和。有两种思路: 第一种是分解的思路,对  $\gamma$  从 1 遍历到  $\Lambda^2$ ,判断  $\gamma$  是否可分解; 第二种是组合的思路,从 1 到  $\Lambda$ ,看这些数能够生成多少种无序三元组。不幸的是,第一种思路的计算复杂度比原先的做法还要高,因此采取第二种思路。

第三种思路需要分类讨论: 我们考虑第一卦限中的格点 (x,y,z)

- 1.  $x, y, z \neq 0$ 
  - x,y,z 均不相等

在 1  $\rightarrow$  Λ 中抽取三个数:  $O(\Lambda) \sim C_{\Lambda}^{3}$ 

这个情况下  $\gamma = x^2 + y^2 + z^2$  在一个卦限内需要被重复计算 6 次

• *x*, *y*, *z* 中有两个相等

在  $1 \to \Lambda$  中抽取两个数:  $O(\Lambda) \sim C_{\Lambda}^2$ 

这个情况下  $\gamma = x^2 + y^2 + z^2$  在一个卦限内需要被重复计算 3 次

x,y,z 均相等

在  $1 \to \Lambda$  中抽取一个数:  $O(\Lambda) \sim C_{\Lambda}^{1} = \Lambda$ 

这个情况下  $\gamma = x^2 + y^2 + z^2$  在一个卦限内需要被重复计算 1 次

2. x, y, z 中有数为 0

此情况中的计算复杂度远低于上面的, 在  $\Lambda$  极大时可以略去

综上,可以发现这个方法的复杂度在  $O(\Lambda) \sim C_{\Lambda}^3$