

计算物理基础第二次作业

柴声都 19307110142

2021 年 10 月 1 日

一 第一题

1 问题描述

Sketch the function $x^3 - 5x + 3 = 0$.

(i) Determine the two positive roots to 4 decimal places using the bisection method.

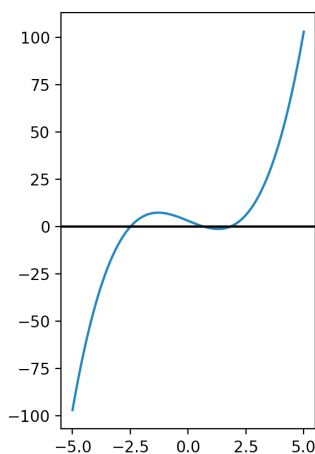
Note: You first need to bracket each of the roots.

(ii) Take the two roots that you found in the previous question (accurate to 4 decimal places) and “polish them up” to 14 decimal places using the Newton-Raphson method.

(iii) Determine the two positive roots to 14 decimal places using the hybrid method.

2 求解思路

通过对 $f(x) = x^3 - 5x + 3$ 作图，如下图所示，可以发现 $x^3 - 5x + 3 = 0$ 的两个正根大约分别在 $[0, 1]$ $[1, 2]$ 两个区间内，因此可以用二分法求解方程，之后用二分法求解得出的结果，采用牛顿法，将根的精度提高；或者可以直接用混合法，直接将方程的解精确到 14 位小数。



图一 $f(x)$ 示意图

对于二分法和牛顿法求解思路与上课老师讲述类似，这里不再赘述，对于混合法，我们思路如下，根据初始二分法区间，从该区间的中点开始使用牛顿法迭代，如果迭代后的值落在原区间之内，则继续使用牛顿法迭代，如果迭代出的值落在原区间之外，则采用二分法，把原区间的中点作为新的迭代值并对区间做更新。

精度的确定上，我采用的方式是，判断迭代后的 x_0 在加减 err 后的函数值是否符号相反，如果相反，则说明精度已经达到。

3 伪代码

Algorithm 1 BISECTION METHOD

Input: initial interval $[a,b]$,root err

Output: root of the function x_0

```

1: while  $\text{FUNC}(x_0 + err) * \text{FUNC}(x_0 - err) > 0$  do
2:    $x_0 = (a + b)/2$ 
3:   if  $\text{FUNC}(x_0) * \text{FUNC}(a) > 0$  then
4:      $a = x_0$ 
5:   end if
6:   if  $\text{FUNC}(x_0) * \text{FUNC}(b) > 0$  then
7:      $b = x_0$ 
8:   end if
9: return  $x_0$ 

```

Algorithm 2 NEWTON-RAPHSON METHOD

Input: initial value x_0 ,root err

Output: root of the function x

```

1: while  $\text{FUNC}(x_0 + err) * \text{FUNC}(x_0 - err) > 0$  do
2:    $x_0 = x_0 - \text{FUNC}(x_0)/\text{FUNC}(x_0)'$ 
3:    $x = x_0$ 
4: return  $x$ 

```

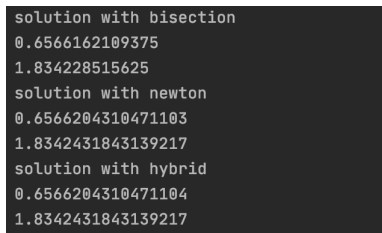
Algorithm 3 HYBRID METHOD

Input: initial interval[a,b] ,root err

Output: root of the function x

```
1: while FUNC( $x0 + err$ ) * FUNC( $x0 - err$ ) > 0 do
2:    $x0 = x0 - \text{FUNC}(x0) / \text{FUNC}(x0)'$ 
3:   if  $x0 < a$  or  $x0 > b$  then
4:      $x0 = (a + b) / 2$ 
5:     if FUNC( $x0$ ) * FUNC( $a$ ) > 0 then
6:        $a = x0$ 
7:     end if
8:     if FUNC( $x0$ ) * FUNC( $b$ ) > 0 then
9:        $b = x0$ 
10:    end if
11:  end if
12:   $x = x0$ 
13: return  $x$ 
```

4 运行结果



```
solution with bisection
0.6566162109375
1.834228515625
solution with newton
0.6566204310471103
1.8342431843139217
solution with hybrid
0.6566204310471104
1.8342431843139217
```

图二 运行结果

二 第二题

1 问题描述

Search for the minimum of the function $f(x, y) = \sin(x + y) + \cos(x + 2y)$ in the whole space.

2 求解思路

利用梯度下降法进行求解，同时我们对学习率进行优化。记 g 是 $f(x)$ 的梯度, $H(x)$ 是 x 处的 Hessian 矩阵，则通过泰勒展开等方式可以得到优化后的梯度下降法（详见《深度学习》伊恩·古德费洛 4.3），即： $x' = x - \epsilon g, \epsilon = g^T g / g^T H g$

3 伪代码

Algorithm 4 GRADIENT DESCEND

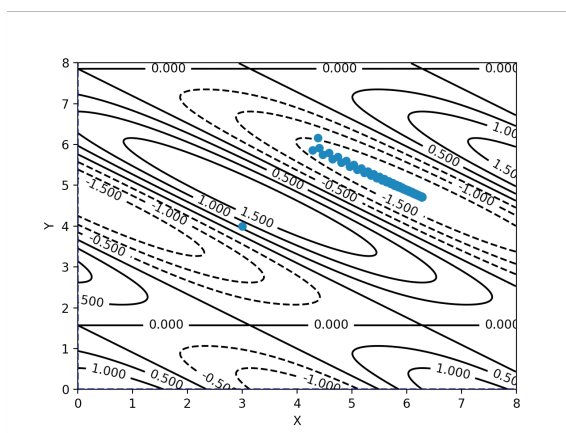
Input: initial point (x_0, y_0) , step_number

Output: Minimum of $f(x, y)$ and the corresponding (x, y)

```
1: for i in range(step_num) do
2:   calculate  $g$  and  $H$ 
3:   calculate  $\epsilon = g^T g / g^T H g$ 
4:    $x_0 = x_0 - \epsilon g$ 
5: end for
6: calculate  $f(x, y)$ 
7: return  $(x, y), f(x, y) = 0$ 
```

4 运行结果

在初值设为 $(3, 4)$ ，迭代次数设为 100 次时，得到最小值为 -1.999997，对应的坐标为 $(6.2784876, 4.71536248)$ ，结果及其迭代过程如图：



图三 迭代过程

```
[6.2784876  4.71536248]
-1.9999977331880137
|
```

图 四 运行结果

三 第三题

1 问题描述

Determine $M(T)$ the magnetization as a function of temperature T for simple magnetic materials.

2 求解思路

磁化满足方程 $\tanh(m(t)/t) = m(t)$, $M(T)$ 和 $m(t)$ 只相差一个常数, T 和 t 也只相差一个常数, 因此只需求解 $m(t)$ 即可, 这里我们采用第一题中的 hybrid method, 在不同的 t 下进行求解。

3 伪代码

Algorithm 5 DETERMINE THE $m(t)$

Input: interval of t , step_number

Output: $m(t)$

- 1: **for** i in range(2), step_num=200 **do**
 - 2: *find the root of $\tanh(m(t)/t) = m(t)$ via hybrid method*
 - 3: $m(t).append = m(t)$
 - 4: **end for**
 - 5: **return** $m(t)$
-

4 运行结果

我们取 t 的范围为 $(0, 2)$ 发现在 $t = 1$ 时有相变，在 $t > 1$ 时方程只有一个零解，在 $0 < t < 1$ 时，方程除了一个零解外还有两个互为相反数的解，图中只取正解，结果如图：

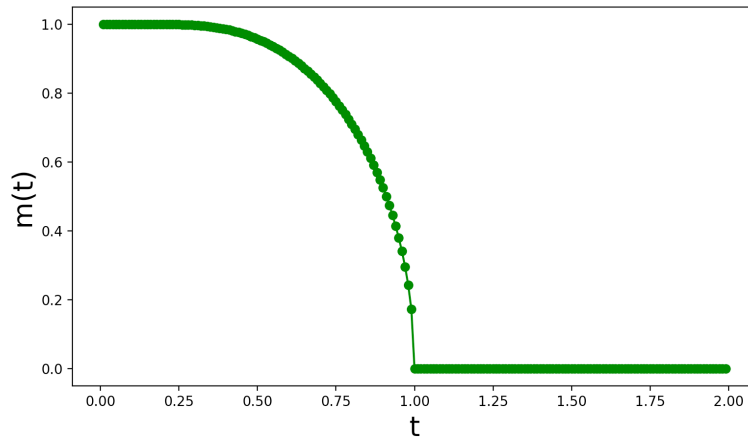


图 五 运行结果