

计算物理第一次作业

钱思天 1600011388

2019 年 9 月 30 日

1 数值误差

1.1

不妨假设每次加法给出的误差为 ϵ_i ，有：

$$\begin{aligned} & (\cdots((x_i \oplus x_2) \oplus x_3) \oplus \cdots) \oplus x_N) \\ &= (\cdots((x_i + x_2)(1 + \epsilon_1) \oplus x_3) \oplus \cdots) \oplus x_N) \\ &= \cdots \end{aligned}$$

略去高阶项，有：

$$\begin{aligned} & (\cdots((x_i \oplus x_2) \oplus x_3) \oplus \cdots) \oplus x_N) \\ &= ((\sum_{i=1}^N x_i) + (x_1 + x_2)\epsilon_1 + \cdots + (\sum_{i=1}^N x_i)\epsilon_{N-1}) \end{aligned}$$

为进行数量级估计，取 $\epsilon_i \sim \frac{\epsilon}{2}$ ，且将 x_i 以 $|\bar{x}|$ 做数量级估计：

$$\epsilon_{sum} \sim \frac{(N+2)(N-1)}{2} * \frac{\epsilon}{2} |\bar{x}|$$

对于均值 \bar{x} ，有：

$$\begin{aligned} \epsilon_{\bar{x}} & \sim \frac{(N+2)(N-1)}{2N} * \frac{\epsilon}{2} |\bar{x}| \\ |\frac{\epsilon_{\bar{x}}}{\bar{x}}| & \sim \frac{(N+2)(N-1)}{2N} * \frac{\epsilon}{2} \end{aligned}$$

1.2

对于两种计算样本方差的算式，由于要避免大数相消，应该要采用第二种计算方式。

1.3

$k = 0$ 时:

$$\int_0^1 \frac{1}{x+5} dx = \ln \frac{6}{5}$$

$k \geq 1$ 时:

$$\begin{aligned} I_k &= \int_0^1 \frac{x^k}{x+5} dx \\ &= \frac{1}{6(k+1)} + \frac{1}{k+1} \int_0^1 \frac{x^{k+1}}{(x+5)^2} dx \end{aligned}$$

可得关系式:

$$\int_0^1 \frac{x^{k+1}}{(x+5)^2} dx = (k+1)I_k - \frac{1}{6}$$

又有:

$$\int_0^1 \frac{x^{k+1}}{(x+5)^2} dx = I_k - 5 \int_0^1 \frac{x^k}{(x+5)^2} dx$$

联立可得:

$$(k+1)I_k - \frac{1}{6} = I_k - 5(kI_{k-1} - \frac{1}{6})$$

整理后有:

$$I_k + 5I_{k-1} = \frac{1}{k}$$

如果计算 I_0 时, 有一个绝对误差 ϵ , 那么, 在计算 I_k 的时候, 每一步计算, 都会把误差放大五倍。同时, I_k 并不能以这么快的速度增长, 相对误差会放大, 因此算法不是稳定的。

2 矩阵的模和条件数

:

2.1

由于矩阵的对角线全是 1, 上三角部分全是-1, 同时是上三角矩阵, 因此:

$$\det(A) = \prod_{i=1}^N A_{ii} = 1$$

矩阵的行列式不为零, 证明矩阵不是奇异矩阵。

2.2

考虑这样一种求逆方式, 由于

$$\text{if } BA = I, \text{ then } BI = A^{-1}$$

即，如果我对矩阵 A 求逆，假设一系列基本变换（即线性变换，i.e. 调换行顺序或调换列顺序或将一行/列乘以一定倍数加到另一行/列上）能使 A 变为单位阵，那么，同样的一系列操作作用在单位阵 I 上，就可以变为 A 的逆矩阵。

按照这一流程，下考虑将 A 变成单位阵的基本变换组合：

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & \cdots & -1 \\ 0 & 1 & \cdots & -1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

因而将 A 变成单位阵 I ，首先把第一列加到之后的每一列上，然后把第二列加到之后的每一列上……

将相同的操作作用在单位阵上，可以得到 A 的逆矩阵：

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 2^{n-1} \\ 0 & 1 & \cdots & 2^{n-2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

将具体的矩阵元表示出来，就是：

$$\begin{aligned} A_{ii}^{-1} &= 1; \\ A_{ij}^{-1} &= 0, j < i \\ A_{ij}^{-1} &= 2^{j-i-1}, j > i; \end{aligned}$$

2.3

当 $p \rightarrow \infty$ 时，矩阵 p - 模的定义式为：

$$\|A\|_{\infty} = \lim_{p \rightarrow \infty} \sup_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_p}{\|x\|_p}$$

向量的 ∞ 模取值如下：

$$\|v\|_{\infty} = \max(|v_i|)$$

因此，对于矩阵的无穷模，首先考虑这样的诱导向量 x 的集合 X ：

$$X = \{x; \forall 1 \leq i \leq N, |x_i| = 1\}$$

则有 $|x|_{\infty} = 1$ ，又有：我们总可以选择各 x_i 的符号与 A 的每一行中各个元素匹配，故有：

$$\forall 1 \leq i \leq N, \sum_{j=1}^N A_{ij} x_j \leq \sum_{j=1}^N |A_{ij}|$$

总能适当选取 $x \in X$ 使得等号成立。可得：

$$\sup_{x \in X} \|Ax\|_{\infty} = \max_{1 \leq i \leq N} \sum_{j=1}^N |A_{ij}|$$

即：

$$\sup_{x \in X} \frac{\|Ax\|_\infty}{\|x\|_\infty} = \max_{1 \leq i \leq N} \sum_{j=1}^N |A_{ij}|$$

对于任意的各分量绝对值相等的诱导矢量 y 可按上述过程计算，只不过 $\|y\|_\infty$ 和 $\|Ay\|_\infty$ 都乘上一个因子，比值的上确界不变。

对于各分量不都相等的诱导矢量 z ，不妨设分量绝对值最大值为 M ，即 $\|z\|_\infty = M$ 。对于 Az 的各个分量，有：

$$\begin{aligned} & \left| \sum_{j=1}^N A_{ij} z_j \right| \\ & \leq \sum_{j=1}^N |A_{ij} z_j| \\ & \leq \sum_{j=1}^N |A_{ij} M| \\ & = M \sum_{j=1}^N |A_{ij}| \end{aligned}$$

有

$$\sup_{\|z\|_\infty = M} \frac{\|Az\|_\infty}{\|z\|_\infty} \leq \max_{1 \leq i \leq N} \sum_{j=1}^N |A_{ij}|$$

综上，有：

$$\sup_x \frac{\|Ax\|_\infty}{\|x\|_\infty} = \max_{1 \leq i \leq N} \sum_{j=1}^N |A_{ij}|$$

证毕。

2.4

对于矢量 x ，其欧式模可以用内积 $(,)$ 的形式给出：

$$\|x\|_2 = \sqrt{(x, x)}$$

那么，对于么正矩阵 U ，对任意矢量 x ，都有：

$$\begin{aligned} & \|Ux\|_2 \\ & = \sqrt{(Ux, Ux)} \\ & = \sqrt{(U^\dagger Ux, x)} \\ & = \sqrt{(x, x)} \end{aligned}$$

换言之，

$$\|U\|_2 = 1$$

同理,

$$\|U^\dagger\|_2 = 1$$

同时, 由于 $\forall x$ 有:

$$\begin{aligned} & \|UAx\|_2 \\ &= \sqrt{(UAx, UAx)} \\ &= \sqrt{(U^\dagger UAx, Ax)} \\ &= \sqrt{(Ax, Ax)} \\ &= \|Ax\|_2 \end{aligned}$$

也可得 $\|UA\|_2 = \|A\|_2$, 对条件数有 $K_2(A) = K_2(UA)$ 。

2.5

$$\begin{aligned} & K_\infty(A) \\ &= \|A\|_\infty * \|A^{-1}\|_\infty \\ &= n2^n \end{aligned}$$

3 Hilbert Matrix

3.1

原问题为:

$$\min_{\vec{c}} D = \min_{\forall c_i} \int_0^1 \left(\sum_{i=1}^n c_i x^{i-1} - f(x) \right)^2$$

可得关系式:

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

即:

$$\int_0^1 dx \sum_{j=1}^n c_j x^{j-1} * x^{i-1} = \int_0^1 dx f(x) x^{i-1}$$

换言之:

$$\begin{aligned} H_{ij} &= \int_0^1 x^{i+j-2} = \frac{1}{i+j-1} \\ b_i &= \int_0^1 f(x) x^{i-1} \end{aligned}$$

3.2

对任意向量 v_i , 则二次型:

$$\begin{aligned}
 & v^T H v \\
 &= \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{v_i v_j}{i+j-1} \\
 &= \int_0^1 \sum_{i,j} t^{i+j-2} * v_i v_j dt \\
 &= \int_0^1 (\sum_i v_i t^{i-1})^2 dt \geq 0
 \end{aligned}$$

即 Hilbert Matrix 是正定的。

3.3

为了估算 Hilbert Matrix 的行列式, 根据计算式, 取对数, 有:

$$\ln(\det(H_n)) = 4 \sum_{i=1}^{n-1} \ln i! - \sum_{j=1}^{2n-1} \ln j!$$

利用斯特林公式 $n! = \sqrt{2\pi n}(\frac{n}{e})^n$ (相关讨论见附录):