计算物理学作业1

1400012141
邵智轩
2017年10月

1 数值误差的避免

1.1 舍入误差的上限估计

$$\begin{aligned}
\frac{1}{n}\bigoplus_{i=1}^{n} x_i &= \frac{1}{n}(...(((x_1+x_2)(1+\epsilon)+x_3)(1+\epsilon)+x_4)(1+\epsilon)...) \\
&\quad （\epsilon\text{只保留到一阶，并记}x_2'=x_1+x_2） \\
&= \frac{1}{n}\left(\sum_{i=1}^{n} x_i+\epsilon\sum_{i=2}^{n}\left(\sum_{j=2}^{i} x_j\right)\right) （\text{第二项中的}x_2\text{为}x_2'） \\
&= \frac{1}{n}\left(\sum_{i=1}^{n} x_i+\epsilon\sum_{i=2}^{n}(n-i+1)x_i\right)
\end{aligned}$$

所以误差不超过

$$\frac{\epsilon}{n}\sum_{i=2}^{n}(n-i+1)x_i,\text{ 其中的}x_2=x_1+x_2$$

1.2 两种求方差的公式的比较

算法一（遍历1次）：

$$S^2=\frac{1}{N-1}\left(\sum_{i=1}^{N} {x_i}^2-N\bar{x}^2\right)$$

算法二（原始公式，遍历2次）：

$$S^2=\frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}(x_i-\bar{x})^2$$

从效率上而言，肯定是第一个算法好。因为第二个算法（原始公式）需要遍历数据两次，一次求和计算平均值，一次求和计算方差；而第一个算法只需要遍历一次就可以计算出数据的和与平方和。

然而第一个算法稳定性和准确性较第二个算法差，因为它容易使两个符号相同，值相近且较大的数相减（抵消现象），会造成有效数字位数的损失，是应该在算法中避免的。考虑一个简单的例子$\{1.01, 0.99\}$，用算法二计算时，相减的两数x_i与$\bar{x}$之差与$\bar{x}$只比$(x_i-\bar{x})/\bar{x}=10^{-2}$；而用算法一计算时，相减的两数$\sum_i {x_i}^2$与$N\bar{x}^2$之差与$N\bar{x}^2$之比$(\sum_i {x_i}^2-N\bar{x}^2)/N\bar{x}^2=10^{-4}$，即算法一在计算过程中更容易造成舍入误差。

1.3 递推求积分的稳定性

递推公式：

$$I_k = 1/k - 5I_{k-1},\quad k = 1, 2, ...$$

如果计算I_0时有微小误差ϵ，即$I_0' = I_0 + \epsilon$，假设之后依赖于I_0'的递推运算都是精确的，

$$I_1' = 1/1 - 5(I_0 + \epsilon) = I_1 - 5\epsilon$$

$$I_2' = 1/2 - 5(I_1 - 5\epsilon) = I_2 + 25\epsilon$$

递推可得

$$I_k' = I_k + (-5)^k\epsilon$$

误差项每次放大5倍，随k增大指数增长。另一方面，由积分公式知I_k随k单调递减。说明相对误差至少呈指数增长。当$n \gg 1$时，用递推计算该问题极不稳定。

2 矩阵的模与条件数

2.1 计算矩阵A的行列式，说明A不是奇异矩阵。

按列用代数余子式展开，逐列递推可得：

$$|A_n| = 1 \times |A_{n-1}| = 1 \times 1 \times |A_{n-2}| = ... = 1$$

所以A不是奇异矩阵。

2.2 给出矩阵的逆矩阵A^{-1}的形式。

根据线性代数的知识，可以根据一系列初等行变换（即左乘一系列初等矩阵）将A变换为单位矩阵I，即：

$$P_t ... P_2 P_1 A = I$$

$$\Rightarrow P_t ... P_2 P_1 I = A^{-1}$$

$$(A, I) \rightarrow (I, A^{-1})$$

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & ... & -1 & -1 & , & 1 & 0 & ... & 0 & 0 \\ 0 & 1 & ... & -1 & -1 & , & 0 & 1 & ... & 0 & 0 \\ ... & ... & ... & ... & ... & , & ... & ... & ... & ... & ... \\ 0 & 0 & ... & 1 & -1 & , & 0 & 0 & ... & 1 & 0 \\ 0 & 0 & ... & 0 & 1 & , & 0 & 0 & ... & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\text{前n-1行+第n行} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & -1 & ... & -1 & 0 & , & 1 & 0 & ... & 0 & 1 \\ 0 & 1 & ... & -1 & 0 & , & 0 & 1 & ... & 0 & 1 \\ ... & ... & ... & ... & ... & , & ... & ... & ... & ... & ... \\ 0 & 0 & ... & 1 & 0 & , & 0 & 0 & ... & 1 & 1 \\ 0 & 0 & ... & 0 & 1 & , & 0 & 0 & ... & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\text{前n-2行+第n-1行} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & -1 & ... & 0 & 0 & , & 1 & 0 & ... & 1 & 2 \\ 0 & 1 & ... & 0 & 0 & , & 0 & 1 & ... & 1 & 2 \\ ... & ... & ... & ... & ... & , & ... & ... & ... & ... & ... \\ 0 & 0 & ... & 1 & 0 & , & 0 & 0 & ... & 1 & 1 \\ 0 & 0 & ... & 0 & 1 & , & 0 & 0 & ... & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\rightarrow ... \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & ... & 0 & 0 & , & 1 & 1 & ... & 2^{n-3} & 2^{n-2} \\ 0 & 1 & ... & 0 & 0 & , & 0 & 1 & ... & 2^{n-3} & 2^{n-3} \\ ... & ... & ... & ... & ... & , & ... & ... & ... & ... & ... \\ 0 & 0 & ... & 1 & 0 & , & 0 & 0 & ... & 1 & 1 \\ 0 & 0 & ... & 0 & 1 & , & 0 & 0 & ... & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$(A^{-1})_{ij} = \begin{cases} 0 & i > j \\ 1 & i = j \\ 2^{-i+j-1} & i < j \end{cases}$$

2.3 证明矩阵的∞模取各行之中行元之和的最大值

$$||x||_\infty = \max_{1\le i\le n} |x_i| \text{记作} x_{max}$$

$$(Ax)_i = \sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j \le x_{max}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|\text{，当}|x_1| = ...|x_n| = x_{max}\text{，且}x_j\text{与}a_{ij}\text{同号时取到等号}$$

$$\frac{||Ax||_\infty}{||x||_\infty} = \frac{1}{x_{max}} \max_{1\le i\le n}(Ax)_i \le \max_{1\le i\le n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|$$

$$\Rightarrow ||A||_\infty = \sup_{x\neq 0}\frac{||Ax||_\infty}{||x||_\infty} = \max_{1\le i\le n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|$$

2.4 酉矩阵

$$||\mathbf{x}||_2 = \sqrt{\mathbf{x}^\dagger\mathbf{x}}$$

$$||\mathbf{Ux}||_2 = \sqrt{(\mathbf{Ux})^\dagger\mathbf{Ux}} = \sqrt{\mathbf{x}^\dagger\mathbf{U}^\dagger\mathbf{Ux}} = \sqrt{\mathbf{x}^\dagger\mathbf{x}} = ||\mathbf{x}||_2,\quad \forall\mathbf{x}\in\mathbb{C}^n$$

$$||\mathbf{U}^\dagger\mathbf{x}||_2 = \sqrt{(\mathbf{U}^\dagger\mathbf{x})^\dagger\mathbf{U}^\dagger\mathbf{x}} = \sqrt{\mathbf{x}^\dagger\mathbf{U}\mathbf{U}^\dagger\mathbf{x}} = \sqrt{\mathbf{x}^\dagger\mathbf{x}} = ||\mathbf{x}||_2,\quad \forall\mathbf{x}\in\mathbb{C}^n$$

$$\Rightarrow ||\mathbf{U}||_2 = ||\mathbf{U}^\dagger||_2 = 1$$

对于任意的$\mathbf{A}\in\mathbb{C}^{n\times n}$，利用酉空间中酉矩阵的保内积性，

$$||\mathbf{UA}||_2 = \sup_{x\neq 0}\frac{||\mathbf{UAx}||_2}{||\mathbf{x}||_2} = \sup_{x\neq 0}\frac{||\mathbf{Ax}||_2}{||\mathbf{x}||_2} = ||\mathbf{A}||_2\text{，同理}||\mathbf{AU}||_2 = ||\mathbf{A}||_2$$

$$K_2(\mathbf{A}) = ||\mathbf{A}||_2||\mathbf{A}^{-1}||_2$$

$$K_2(\mathbf{UA}) = ||\mathbf{UA}||_2||(\mathbf{UA})^{-1}||_2 = ||\mathbf{UA}||_2||\mathbf{A^{-1}U^{-1}}||_2 = ||\mathbf{A}||_2||\mathbf{A}^{-1}||_2 = K_2(\mathbf{A})$$

2.5 计算上面给出的具体 的矩阵的条件数$K_\infty(A) = ||A||_\infty ||A^{-1}||_\infty$

$$||A||_\infty = \max_{1\le i\le n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}| = \sum_{j=1}^{n}|a_{1j}| = n$$

$$||A^{-1}||_\infty = \sum_{j=1}^{n}|(A^{-1})_{1j}| = 1 + \sum_{j=0}^{n-2}2^j = 2^{n-1}$$

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

3 Hilbert 矩阵

3.1 说明系数方程的矩阵形式为$H_n\cdot c = b$

$$D = ||P_n(x) - f(x)||_2 = \langle P_n - f, P_n - f\rangle = \langle P_n, P_n\rangle - 2\langle P_n, f\rangle + \langle f, f\rangle$$

$D(c_1, c_2, ..., c_n)$取极值的必要条件为，系数$c_1, c_2, ..., c_n$满足方程：

$$\frac{\partial D}{\partial c_i} = 0,\quad i = 1, 2, ..., n$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial D}{\partial c_k} &= \frac{\partial}{\partial c_k}(\langle P_n, P_n\rangle - 2\langle P_n, f\rangle + \langle f, f\rangle)\\
&= \frac{\partial}{\partial c_k}(\sum_{j=1}^{n}c_j\langle x^{j-1}, \sum_{l=1}^{n}c_l x^{l-1}\rangle - 2\sum_{j=1}^{n}c_j\langle x^{j-1}, f\rangle)\\
&= \frac{\partial}{\partial c_k}(\sum_{j=1}^{n}\sum_{l=1}^{n}c_j c_l\langle x^{j-1}, x^{l-1}\rangle) - 2\langle x^{k-1},\quad f\rangle\\
&= 2c_k\langle x^{k-1}, x^{k-1}\rangle + 2\sum_{i=1, i\neq k}^{n}c_i\langle x^{k-1}, x^{i-1}\rangle - 2\langle x^{k-1},\quad f\rangle\\
&= 2\sum_{i=1}^{n}c_i\langle x^{k-1}, x^{i-1}\rangle - 2\langle x^{k-1},\quad f\rangle = 0,\quad k = 1, 2, ..., n
\end{aligned}$$

$$\Leftrightarrow \sum_{i=1}^{n}c_i\langle x^{k-1}, x^{i-1}\rangle = \langle x^{k-1},\quad f\rangle,\quad k = 1, 2, ..., n$$

$$\Leftrightarrow \begin{pmatrix} \langle 1,1\rangle & \langle 1,x\rangle & ... & \langle 1,x^{n-1}\rangle \\ \langle x,1\rangle & \langle x,x\rangle & ... & \langle x,x^{n-1}\rangle \\ ... & ... & ... & ... \\ \langle x^{n-1},1\rangle & \langle x^{n-1},x\rangle & ... & \langle x^{n-1},x^{n-1}\rangle \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ ... \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle 1,f\rangle \\ \langle x,f\rangle \\ ... \\ \langle x^{n-1},f\rangle \end{pmatrix}$$

即$H_n\cdot c = b$，其中

$$H_{ij} = \langle x^{i-1}, x^{j-1}\rangle = \int_0^1 x^{i+j-2}\mathrm{d}x = \frac{1}{i+j-1}$$

$$b_i = \langle x^{i-1}, f\rangle = \int_0^1 x^{i-1}\cdot f(x)\mathrm{d}x$$

$$H_n = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \cdots & \frac{1}{n} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \cdots & \frac{1}{n+1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n+1} & \cdots & \frac{1}{2n-1} \end{pmatrix}$$

3.2 证明Hilbert矩阵为对称正定非奇异的

对称性$H_{ij} = H_{ji}$显然。

3.2.1 方法一

利用$\mathbf{H_n}$的定义，$\forall \mathbf{c} \in \mathbb{R}^n$,

$$\mathbf{c^T H_n c} = \sum_{i,j}^{n} c_i (H_n)_{ij} c_j = \sum_{i=1}^{n} c_i \langle x^{i-1}, x^{j-1}\rangle \sum_{j=1}^{n} c_j = \langle P_n(x), P_n(x)\rangle \geq 0$$

当且仅当$P_n(x) = 0$，即$\mathbf{c} = \mathbf{0}$取等号。

由于$1, x, ..., x^{n-1}$线性无关，可以证明方程$\mathbf{H_n a} = \mathbf{0}$只有全零解（即$\mathbf{H_n}$非奇异），用反证法。若存在一组不全为零的解$\{a_j\}$：

$$\sum_{j=1}^{n} \langle x^{i-1}, x^{j-1}\rangle a_j = 0, \quad i = 1, 2, ..., n$$

$$\Leftrightarrow \langle x^{i-1}, \sum_{j=1}^{n} a_j x^{j-1}\rangle = 0, \quad i = 1, 2, ..., n$$

将上述第i个方程乘以a_i，累加所有方程得到：

$$\langle \sum_{i=1}^{n} a_i x^{i-1}, \sum_{j=1}^{n} a_j x^{j-1}\rangle = 0$$

根据内积的正定性，必有$\sum_i^n a_i x^{i-1} = 0$，与$1, x, ..., x^{n-1}$线性无关的前提矛盾。所以方程$\mathbf{H_n a} = \mathbf{0}$只有全零解，$\mathbf{H_n}$非奇异。

3.2.2 方法二

由线性代数的理论，实对称矩阵H_n正定的充分必要条件为H_n的所有顺序主子式全大于0。所以不妨先求H_n的行列式，若$det(H_n) > 0, \ \ \forall n > 0$，则正定性和非奇异性同时得证。

考虑n阶Hilbert矩阵的行列式，注意到初等行（列）变换不改变矩阵的行列式。

$$|H_n| \quad = \quad \begin{vmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \cdots & \frac{1}{n-1} & \frac{1}{n} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \cdots & \frac{1}{n} & \frac{1}{n+1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{1}{n-1} & \frac{1}{n} & \cdots & \frac{1}{2n-3} & \frac{1}{2n-2} \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n+1} & \cdots & \frac{1}{2n-2} & \frac{1}{2n-1} \end{vmatrix}$$

（第1行-第2行，第2行-第3行，···，第n-1行-第n行）

$$= \begin{vmatrix} \frac{1}{1\cdot2} & \frac{1}{2\cdot3} & \ldots & \frac{1}{(n-1)\cdot n} & \frac{1}{n\cdot(n+1)} \\ \frac{1}{2\cdot3} & \frac{1}{3\cdot4} & \ldots & \frac{1}{n\cdot(n+1)} & \frac{1}{(n+1)\cdot(n+2)} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \frac{1}{(n-1)\cdot n} & \frac{1}{n\cdot(n+1)} & \ldots & \frac{1}{(2n-3)\cdot(2n-2)} & \frac{1}{(2n-2)\cdot(2n-1)} \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n+1} & \ldots & \frac{1}{2n-2} & \frac{1}{2n-1} \end{vmatrix}$$

（第1行-第2行，第2行-第3行，···，第n-2行-第n-1行）

$$= \begin{vmatrix} \frac{2}{1\cdot2\cdot3} & \frac{2}{2\cdot3\cdot4} & \ldots & \frac{2}{(n-1)\cdot n\cdot(n+1)} & \frac{2}{n\cdot(n+1)\cdot(n+2)} \\ \frac{2}{2\cdot3\cdot4} & \frac{2}{3\cdot4\cdot5} & \ldots & \frac{2}{n\cdot(n+1)\cdot(n+2)} & \frac{2}{(n+1)\cdot(n+2)\cdot(n+3)} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \frac{1}{(n-1)\cdot n} & \frac{1}{n\cdot(n+1)} & \ldots & \frac{1}{(2n-3)\cdot(2n-2)} & \frac{1}{(2n-2)\cdot(2n-1)} \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n+1} & \ldots & \frac{1}{2n-2} & \frac{1}{2n-1} \end{vmatrix}$$

$$= \ldots = \begin{vmatrix} \frac{(n-1)!}{1\cdot2\cdot\ldots\cdot n} & \frac{(n-1)!}{2\cdot3\cdot\ldots\cdot(n+1)} & \ldots & \frac{(n-1)!}{(n-1)\cdot n\cdot\ldots\cdot(2n-2)} & \frac{(n-1)!}{n\cdot(n+1)\cdot\ldots\cdot(2n-1)} \\ \frac{(n-2)!}{2\cdot3\cdot\ldots\cdot n} & \frac{(n-2)!}{3\cdot4\cdot\ldots\cdot(n+1)} & \ldots & \frac{(n-2)!}{n\cdot(n+1)\cdot\ldots\cdot(2n-2)} & \frac{(n-2)!}{(n+1)\cdot(n+2)\cdot\ldots\cdot(2n-1)} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \frac{1}{(n-1)\cdot n} & \frac{1}{n\cdot(n+1)} & \ldots & \frac{1}{(2n-3)\cdot(2n-2)} & \frac{1}{(2n-2)\cdot(2n-1)} \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n+1} & \ldots & \frac{1}{2n-2} & \frac{1}{2n-1} \end{vmatrix}$$

（提出每行的分子上的公因子）

$$= 1!\cdot2!\cdot\ldots\cdot(n-1)! \begin{vmatrix} \frac{1}{1\cdot2\cdot\ldots\cdot n} & \frac{1}{2\cdot3\cdot\ldots\cdot(n+1)} & \ldots & \frac{1}{(n-1)\cdot n\cdot\ldots\cdot(2n-2)} & \frac{1}{n\cdot(n+1)\cdot\ldots\cdot(2n-1)} \\ \frac{1}{2\cdot3\cdot\ldots\cdot n} & \frac{1}{3\cdot4\cdot\ldots\cdot(n+1)} & \ldots & \frac{1}{n\cdot(n+1)\cdot\ldots\cdot(2n-2)} & \frac{1}{(n+1)\cdot(n+2)\cdot\ldots\cdot(2n-1)} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \frac{1}{(n-1)\cdot n} & \frac{1}{n\cdot(n+1)} & \ldots & \frac{1}{(2n-3)\cdot(2n-2)} & \frac{1}{(2n-2)\cdot(2n-1)} \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n+1} & \ldots & \frac{1}{2n-2} & \frac{1}{2n-1} \end{vmatrix}$$

（提出每列的分母上的公因子）

$$= \frac{1!\cdot2!\cdot\ldots\cdot(n-1)!}{n\cdot(n+1)\cdot\ldots\cdot(2n-1)} \begin{vmatrix} \frac{1}{1\cdot2\cdot\ldots\cdot(n-1)} & \frac{1}{2\cdot3\cdot\ldots\cdot n} & \ldots & \frac{1}{(n-1)\cdot n\cdot\ldots\cdot(2n-3)} & \frac{1}{n\cdot(n+1)\cdot\ldots\cdot(2n-2)} \\ \frac{1}{2\cdot3\cdot\ldots\cdot(n-1)} & \frac{1}{3\cdot4\cdot\ldots\cdot n} & \ldots & \frac{1}{n\cdot(n+1)\cdot\ldots\cdot(2n-3)} & \frac{1}{(n+1)\cdot(n+2)\cdot\ldots\cdot(2n-2)} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \frac{1}{n-1} & \frac{1}{n} & \ldots & \frac{1}{2n-3} & \frac{1}{2n-2} \\ 1 & 1 & \ldots & 1 & 1 \end{vmatrix}$$

（第1列-第2列，第2列-第3列，···，第n-1列-第n列）

$$= \frac{1!\cdot2!\cdot\ldots\cdot(n-1)!}{n\cdot(n+1)\cdot\ldots\cdot(2n-1)} \begin{vmatrix} \frac{n-1}{1\cdot2\cdot\ldots\cdot n} & \frac{n-1}{2\cdot3\cdot\ldots\cdot(n+1)} & \ldots & \frac{n-1}{(n-1)\cdot n\cdot\ldots\cdot(2n-2)} & \frac{1}{n\cdot(n+1)\cdot\ldots\cdot(2n-2)} \\ \frac{n-2}{2\cdot3\cdot\ldots\cdot n} & \frac{n-2}{3\cdot4\cdot\ldots\cdot(n+1)} & \ldots & \frac{n-2}{n\cdot(n+1)\cdot\ldots\cdot(2n-2)} & \frac{1}{(n+1)\cdot(n+2)\cdot\ldots\cdot(2n-2)} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \frac{1}{(n-1)\cdot n} & \frac{1}{n\cdot(n+1)} & \ldots & \frac{1}{(2n-3)\cdot(2n-2)} & \frac{1}{2n-2} \\ 0 & 0 & \ldots & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

（降为n-1阶行列式）

$$= \frac{1!\cdot2!\cdot\ldots\cdot(n-1)!}{n\cdot(n+1)\cdot\ldots\cdot(2n-1)}$$

$$
\begin{vmatrix}
\frac{n-1}{1\cdot2\cdot\ldots\cdot n} & \frac{n-1}{2\cdot3\cdot\ldots\cdot(n+1)} & \cdots & \frac{n-1}{(n-2)\cdot(n-1)\cdot\ldots\cdot(2n-3)} & \frac{n-1}{(n-1)\cdot n\cdot\ldots\cdot(2n-2)} \\
\frac{n-2}{2\cdot3\cdot\ldots\cdot n} & \frac{n-2}{3\cdot4\cdot\ldots\cdot(n+1)} & \cdots & \frac{n-2}{(n-1)\cdot n\cdot\ldots\cdot(2n-3)} & \frac{n-2}{n\cdot(n+1)\cdot\ldots\cdot(2n-2)} \\
\ldots & \ldots & \cdots & \ldots & \ldots \\
\frac{2}{(n-2)\cdot(n-1)\cdot n} & \frac{2}{(n-1)\cdot n\cdot(n+1)} & \cdots & \frac{2}{(2n-5)\cdot(2n-4)\cdot(2n-3)} & \frac{2}{(2n-4)\cdot(2n-3)\cdot(2n-2)} \\
\frac{1}{(n-1)\cdot n} & \frac{1}{n\cdot(n+1)} & \cdots & \frac{1}{(2n-4)\cdot(2n-3)} & \frac{1}{(2n-3)(2n-2)}
\end{vmatrix}
$$

（提出每行的分子上的公因子，提出每列的分母上的公因子）

$$
= \frac{1!\cdot2!\cdot\ldots\cdot(n-1)!\cdot(n-1)!}{(2n-1)!}\frac{((n-1)!)^2}{(2n-2)!}
$$

$$
\begin{vmatrix}
\frac{1}{1\cdot2\cdot\ldots\cdot(n-1)} & \frac{1}{2\cdot3\cdot\ldots\cdot n} & \cdots & \frac{1}{(n-2)\cdot(n-1)\cdot\ldots\cdot(2n-4)} & \frac{1}{(n-1)\cdot n\cdot\ldots\cdot(2n-3)} \\
\frac{1}{2\cdot3\cdot\ldots\cdot(n-1)} & \frac{1}{3\cdot4\cdot\ldots\cdot n} & \cdots & \frac{1}{(n-1)\cdot n\cdot\ldots\cdot(2n-4)} & \frac{1}{n\cdot(n+1)\cdot\ldots\cdot(2n-3)} \\
\ldots & \ldots & \cdots & \ldots & \ldots \\
\frac{1}{(n-2)\cdot(n-1)} & \frac{1}{(n-1)\cdot n} & \cdots & \frac{1}{(2n-5)\cdot(2n-4)} & \frac{1}{(2n-4)\cdot(2n-3)} \\
\frac{1}{n-1} & \frac{1}{n} & \cdots & \frac{1}{2n-4} & \frac{1}{2n-3}
\end{vmatrix}
$$

（提出公因子，凑成第五个等号右边的行列式形式）

$$
= \frac{1!\cdot2!\cdot\ldots\cdot(n-1)!\cdot(n-1)!}{(2n-1)!}\frac{((n-1)!)^2}{(2n-2)!}\frac{1}{(n-2)!(n-3)!\ldots2!\cdot1!}
$$

$$
\begin{vmatrix}
\frac{(n-2)!}{1\cdot2\cdot\ldots\cdot(n-1)} & \frac{(n-2)!}{2\cdot3\cdot\ldots\cdot n} & \cdots & \frac{(n-2)!}{(n-2)\cdot(n-1)\cdot\ldots\cdot(2n-4)} & \frac{(n-2)!}{(n-1)\cdot n\cdot\ldots\cdot(2n-3)} \\
\frac{(n-3)!}{2\cdot3\cdot\ldots\cdot(n-1)} & \frac{(n-3)!}{3\cdot4\cdot\ldots\cdot n} & \cdots & \frac{(n-3)!}{(n-1)\cdot n\cdot\ldots\cdot(2n-4)} & \frac{(n-3)!}{n\cdot(n+1)\cdot\ldots\cdot(2n-3)} \\
\ldots & \ldots & \cdots & \ldots & \ldots \\
\frac{1}{(n-2)\cdot(n-1)} & \frac{1}{(n-1)\cdot n} & \cdots & \frac{1}{(2n-5)\cdot(2n-4)} & \frac{1}{(2n-4)\cdot(2n-3)} \\
\frac{1}{n-1} & \frac{1}{n} & \cdots & \frac{1}{2n-4} & \frac{1}{2n-3}
\end{vmatrix}
$$

（比照第五个等号右边的行列式，当前行列式就等于$|H_{n-1}|$）

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1!\cdot2!\cdot\ldots\cdot(n-1)!\cdot(n-1)!}{(2n-1)!}\frac{((n-1)!)^2}{(2n-2)!}\frac{1}{(n-2)!(n-3)!\ldots2!\cdot1!}|H_{n-1}| \\
&= \frac{((n-1)!)^4}{(2n-1)!(2n-2)!}|H_{n-1}| \\
&= \frac{c_n^4}{c_{2n}}|H_1| = \frac{c_n^4}{c_{2n}},\quad c_n = 1!\cdot2!\cdot\ldots\cdot(n-1)!
\end{aligned}
$$

正定性，非奇异性自然满足。

3.3 估计$det(H_n)$的值

$$
|H_n| = \frac{((n-1)!)^4}{(2n-1)!(2n-2)!}|H_{n-1}|
$$

当n比较大时，

$$
\begin{aligned}
& \ln|H_n| - \ln|H_{n-1}| \\
= \;& 4\ln(n-1)! - \ln(2n-1)! - \ln(2n-2)! \\
\sim \;& 4(n-1)\ln(n-1) - 4n - (2n-1)\ln(2n-1) + (2n-1) - (2n-2)\ln(2n-2) + (2n-2)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= 2(n-1)\ln\frac{(n-1)^2}{(2n-1)(2n-2)} - \ln(2n-1) - 3 \\
&\sim -(2\ln 4)n - \ln(2n-1)
\end{aligned}
$$

$$\text{递推可得} \Rightarrow \ln|H_n| \sim -\ln 4 \cdot n^2 + \text{低阶项，当}n \gg 1$$

即$\ln|H_n|$大约按二次递减。由此可估算，$\ln|H_{10}| \sim -\ln 4 \times 10^2 = -1.39 \times 10^2$。

当然，当n较小，例如$n \leq 10$时，直接计算也是可行且不麻烦的。Mathematica给出$\ln|H_{10}|$的精确值(-1.21×10^2)。当n进一步增大时，上面的估计式会越来越接近真实值。由此可以看出，H_n的奇异性随n增大迅速增大。

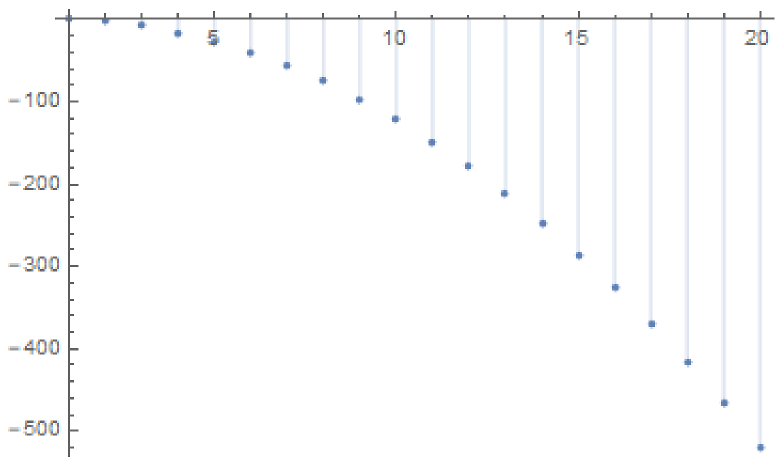

Figure 1: $\ln|H_n|$—n曲线（精确值）

3.4 用GEM和Cholesky分解求解系数矩阵为Hilbert矩阵的线性方程组（编程题）

用Python编写。默认使用双精度浮点数。对于GEM，我分别试验了不选主元和选主元两种情况。

可以证明，解应为整数。

在n较小时，两个高斯消元法的误差差不多，而Cholesky分解的误差最大。这是由于n较小时三种算法中的舍入误差都还很有限，而Cholesky算法中包含的开方运算容易引入新的误差。

如$n = 4$时：

Cholesky Method Solution:
[-3.999999999999037, 59.999999999988894, -179.99999999997303,139.99999999998238]
GEM Solution:
[-3.999999999999698, 59.999999999996284, -179.99999999999065, 139.99999999999375]
GEM(Permutated) Solution:
[-3.9999999999993143, 59.999999999992234, -179.99999999998124, 139.99999999998778]

$n = 5$时：

Cholesky Method Solution:
[4.9999999999889155, -119.99999999982066, 629.9999999993023, -1119.999999999025, 629.9999999995512]

GEM Solution:
[4.999999999994429, -119.99999999991255, 629.9999999996653, -1119.9999999995368, 629.9999999997882]
GEM(Permutated) Solution:
[5.00000000000313, -120.00000000003418, 630.0000000002219, -1120.0000000004109, 630.0000000002276]

当n进一步增大时，三种方法中，部分选主元的高斯消元法最稳定、准确，其解离整数值最接近，Cholesky分解法次之，不选主元的高斯消元法偏差最大。这是由于当n进一步增大，Hilbert矩阵的奇异性增大，高斯消元法中的舍入误差很大，而不选主元的高斯消元法会将很小的主元放在分母上，使得舍入误差进一步放大。另外，解向量中靠前的分量（绝对值较小的分量）相对误差较大。

例如$n = 9$时：
Cholesky Method Solution:
[8.999939371853543, -719.9957392616769, 13859.926896755227, -110879.47259727003, 450448.04913668585, -1009003.9891110897, 1261255.367137961, -823677.1880404878, 218789.30232897875]
GEM Solution:
[8.999937936201604, -719.995621823393, 13859.92466109795, -110879.45520166564, 450447.98098434444, -1009003.8425172686, 1261255.1915232483, -823677.0781969633, 218789.27438015208]
GEM(Permutated) Solution:
[8.99994493326085, -719.9961364400077, 13859.933787947395, -110879.52272417705, 450448.23572850757, -1009004.3746538642, 1261255.8142732792, -823677.4603444034, 218789.37008071435]

$n = 10$时：
Cholesky Method Solution:
[-9.997668234398589, 989.7983719609543, -23755.703408668687, 240200.92882747028, -1261073.6092824137, 3783267.576441609, -6725879.256791486, 7000467.5376583515, -3937793.4846944376, 923686.2089171143]
GEM Solution:
[-9.997364824230317, 989.7718609478036, -23755.133779704665, 240195.71429029733, -1261048.597183709, 3783198.5011159275, -6725765.489566751, 7000357.237862889, -3937735.417590592, 923673.4084964811]
GEM(Permutated) Solution:
[-9.998072932707146, 989.8337192577018, -23756.461985856462, 240207.863148393, -1261106.822919476, 3783359.177533509, -6726029.935291705, 7000613.456739208, -3937870.2235662565, 923703.1093659316]

当$n = 11$时，三种解法与真实值的偏差均已达到10^{-3}量级，解分量x_0与真实解11的相对偏差分别为：
Cholesky: 5.3×10^{-3}
GEM: 6.3×10^{-3}
GEM(Permutated): 4.8×10^{-3}

当$n > 11$后，解明显不可靠，离真实解（应为整数）偏差较远。如$n = 12$时，x_0在三种算法下的相对误差都在10%量级，$n = 13$时都在100%量级。当n再加大时，Cholesky算法会由于被开根的数小于零而报错。

综上所述，无论哪种情况下，部分选主元的高斯消元法都是比较稳定准确的。

当然以上结论是一般而论，不是绝对的。比如在上面$n = 4$的例子中，选主元的高斯消元法准确性竟不如不选主元的算法。