计算物理第四次作业

1. 利用 QR 算法、Jacobi 算法、Sturm 序列 + 对分法，求下列矩阵的本征值

$$T = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 4 \end{pmatrix} \tag{1}$$

对于 QR 算法和 Jacobi 算法，请写出第 5,10,15,20,$\cdots$ 次迭代后的矩阵 T_k。对于 Sturm 序列 + 对分法请写出由圆盘定理确定的本征值范围以及第 5,10,15,20,$\cdots$ 次迭代后本征值的近似值。

2. **幂次法求矩阵最大模的本征值和本征矢**　本题中我们考虑利用幂次法 (power method) 来求一个矩阵 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 的本征值的问题。同时将它运用到一个具体的实例：一维原子链的振动。

考虑一个一维的原子链的经典振动问题。假定我们有 N 个原子，每个都具有质量 m，均匀相间排列在 x 轴上。相邻两个原子间有相同的弹簧 (倔强系数均为 k) 相连。为了简化讨论我们取 $k/m = 1$。整个原子链上的原子可以在其平衡位置附近做小振动。如果我们将第 i 个原子偏离平衡位置的位移记为 $x_i(t)$，那么这些原子满足的经典运动方程为：

$$\ddot{x}_i - [x_{i-1} + x_{i+1} - 2x_i] = 0, \quad i = 1, 2, \cdots, N \tag{2}$$

当然为了明确起见，我们还必须加上合适的边界条件。为了方便我们取周期性边界条件，即 $x_{i+N}(t) \equiv x_i(t)$。因此，物理上这 N 个粒子实际上是连成一个圆环。于是上述方程可以写为矩阵方程，

$$\ddot{x} = -A \cdot x \tag{3}$$

其中 A 是一个矩阵，其矩阵元为

$$(-A)_{ij} = \delta_{i-1,j} + \delta_{i+1,j} - 2\delta_{i,j} \tag{4}$$

$x(t) = (x_1(t), \cdots, x_N(t))^T \in \mathbb{C}^N$ 是解矢量。我们将尝试 $x(t) = xe^{-i\omega t}$ 的解，从而振幅 x 原则上可以是任意的复矢量，真实的物理的解被认为是这个复矢量解的实部：$x_{\text{phy.}}(t) = \Re(x(t))$。

(a) 考虑一个一维的原子链的经典振动解，尝试 $x(t) = xe^{-i\omega t}$ ，说明振幅 $x \in \mathbb{C}^n$ 满足本征方程：$A \cdot x = \lambda x$，本征值 $\lambda = \omega^2$。

(b) 是的，这个题目可以轻易地解析求解。但现在我们假装不知道这点。请写一个利用下面介绍的幂次法求解上述本征值问题的程序。求出体系最大的本征频率的平方 $\omega^2_{\max}$。这对应于最大的 λ。

【幂次法】：我们从任意一个单位矢量 $q^{(0)} \in \mathbb{C}^N$ 出发，我们从 $k = 1, 2, \cdots$ 开始构造迭代，

$$\begin{aligned} z^{(k)} &= A \cdot q^{(k-1)}, \quad q^{(k)} = z^{(k)}/\|z^{(k)}\|, \qquad (5) \\ \nu^{(k)} &= [q^{(k)}]^\dagger A q^{(k)} \qquad (6) \end{aligned}$$

现在假定矩阵 A 是可对角化的，从而它的本征值构成一组完备的基。我们约定矩阵 A 的本征值排列如下，$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_N$。相应的本征矢记为 $v_1, \cdots, v_N$。它们可以构成正交归一完备的一组基矢。将初始的矢量 $q^{(0)}$ 按照本征矢进行展开。证明只要初始的矢量 $q^{(0)}$ 在 v_1 方向的投影不恒等于零，上述的幂次法迭代最终会获得相应的本征值和本征矢，即：

$$\lim_{k\to\infty} \nu^{(k)} = \lambda_1, \quad \lim_{k\to\infty} q^{(k)} = v_1 \qquad (7)$$

最后，对于 $N = 10$ 的情形，利用你的程序给出相应的本征值以及本征矢。

3. 参考课件“常微分方程”中的“洛伦兹吸引子”，重复结果，并额外给出至少 2 组不同的 β,ρ,σ 的结果

$$\begin{pmatrix} y_1' \\ y_2' \\ y_3' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\beta & 0 & y_2 \\ 0 & -\sigma & \sigma \\ -y_2 & \rho & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} \qquad (8)$$