# 计算物理第一次作业

1. 对 $x$ 从 0 到 100，以 10 为步长，编写程序，比较、讨论下列三种计算 $e^x$ 的方法：

（1）直接展开法

$$e^{-x} = \sum_0^\infty (-1)^n \frac{x^n}{n!}$$

（2）递归法

$$\begin{aligned} e^{-x} &= \sum_0^\infty s_n = \sum_0^\infty (-1)^n \frac{x^n}{n!} \\ s_n &= -s_{n-1}\frac{x}{n} \end{aligned}$$

（3）先利用（2）计算 $e^x$，然后求倒数。

2. **矩阵的模和条件数** 考虑一个具体的上三角矩阵 $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$，其所有对角元都为 1，而所有上三角部分都为 $-1$。

(a) 计算矩阵 $A$ 的行列式，说明 $A$ 的确不是奇异矩阵。

(b) 给出矩阵的逆矩阵 $A^{-1}$ 的形式。

(c) 如果采用矩阵 $p$ 模的定义

$$\|A\|_p = \sup_{x\neq 0} \frac{\|Ax\|_p}{\|x\|_p}$$

其中等式右边 $\|\cdot\|_p$ 是标准定义的矢量 $p$ 模，说明如果取 $p \to \infty$，得到所谓 $\infty$ 模为，

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

(d) 矩阵的模有多种定义方法，一种常用的是 $p = 2$ 的欧氏模 $\|\cdot\|_2$。对于幺正矩阵 $U \in \mathbb{C}^{n\times n}$，证明 $\|U\|_2 = \|U^\dagger\|_2 = 1$。证明对于任意的 $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$，$\|UA\|_2 = \|A\|_2$，因此，如果利用欧氏模定义条件数，$K_2(A) = K_2(UA)$。

(e) 利用这个定义计算上面给出的具体的矩阵的条件数 $K_\infty(A) = \|A\|_\infty \|A^{-1}\|_\infty$。

**3.Hilbert 矩阵** 本题中我们将考虑一个著名的、接近奇异的矩阵，称为 Hilbert 矩阵。

(a) 考虑区间 $[0,1]$ 上的任意函数 $f(x)$，我们试图用一个 $(n-1)$ 次的多项式 $P_n(x) = \sum_{i=1}^n c_i x^{i-1}$（从而有 $n$ 个待定系数 $c_i$）来近似 $f(x)$。构建两者之间的差的平方的积分

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

如果我们要求 $D$ 取极小值，说明各个系数 $c_i$ 所满足的方程为

$$\sum_{j=1}^n (H_n)_{ij} c_j = b_i, \quad i,j = 1, \cdots, n$$

或者简写为矩阵形式 $H_n \cdot c = b$，其中 $c, b \in \mathbb{R}^n$，而 $H_n \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 就称为 $n$ 阶的 Hilbert 矩阵。给出矩阵 $H_n$ 的矩阵元的表达式和矢量 $b$ 的表达式（用包含函数 $f(x)$ 的积分表达）。

(b) 证明矩阵 $H_n$ 是对称的正定矩阵，即对于任意的 $c \in \mathbb{R}^n$，说明 $c^T \cdot H_n c \geq 0$ 其中等号只有当 $c = 0$ 时会取得。进而运用线性代数的知识论证 Hilbert 矩阵 $H_n$ 是非奇异的。

(c) 虽然矩阵 $H_n$ 是非奇异的，但是它的行列式随着 $n$ 的增加会迅速减小。事实上，它的行列式竟然有严格的表达式：

$$\det(H_n) = \frac{c_n^4}{c_{2n}}, \quad c_n = 1! \cdot 2! \cdots (n-1)!$$

因此 $\det(H_n)$ 会随着 $n$ 的增加而迅速指数减小。结合上述 $\det(H_n)$ 的表达式，估计出 $\det(H_n)$，$n \leq 10$ 的数值 (【提示】：取对数)。

(d) 由于 Hilbert 矩阵的近奇异性，它具有非常巨大的条件数。因此在求解它的线性方程时，误差会被放大。为了有所体会，请写两个程序，分别利用 GEM 和 Cholesky 分解来求解线性方程 $H_n \cdot x = b$，其中 $b = (1, 1, \cdots, 1) \in \mathbb{R}^n$。从小的 $n$ 开始并逐步增加 $n$(比如说一直到 $n = 10$)，两种方法给出的解有差别吗？如果有，你认为哪一个更为精确呢？简单说明理由。