计算物理学作业 1

- 完成所有题目。作业截止日期课上宣布。
- 请提交一个 PDF 格式的作业解答，其中可以描述相应的解题步骤，必要的图表等 (建议用 LaTeX 进行排版)
- 请提交程序的源文件 (格式:python/c)，并请提交一个源文件的说明文档 (任意可读格式)，主要说明源程序如何编译、输入输出格式等方面的事宜。请保证它们能够顺利编译通过，同时运行后产生你的解答中的结果。
- 所有文件打包后发送到课程的公邮。压缩包的文件名和邮件题目请取为“学号 + 姓名 + 作业 1”

1. **数值误差的避免**

   本题中我们分析一些常见的数值误差情况。

   (a) 考虑一个 N 个数据的样本 x_1，$\cdots$，x_N，它的样本平均值为

   $$\bar{x} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i, \tag{1}$$

   假定我们需要计算的求和项数比较多，而每一个 x_i 的求和有可能造成舍入误差。给出计算 $\bar{x}$ 的舍入误差的最大可能的上限的一个估计，用样本数目 N 以及机器舍入误差精度 $\epsilon_M/2$ 来表达。

   (b) 考虑样本的方差的计算。方差具有两个标准的公式，

   $$\begin{aligned} S^2 &= \frac{1}{N-1}\left(\sum_{i=1}^{N} x_i^2 - N\bar{x}^2\right), \\ S^2 &= \frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}(x_i-\bar{x})^2 \end{aligned} \tag{2}$$

   这两个公式在数值计算中哪一个更为稳定和准确?

   (c) 假定我们考虑计算积分

   $$I_n = \int_0^1 dx\,\left(\frac{x^n}{x+5}\right). \tag{3}$$

   证明积分 I_n 满足下列递推公式:

   $$I_0 = \ln(6/5), \quad I_k + 5I_{k-1} = 1/k, \quad k = 1, 2, \cdots \tag{4}$$

   如果我们计算 I_0 时有一个微小的误差 ϵ，利用上面的递推公式计算 $n \gg 1$ 时的 I_n 是稳定的吗?

2. **矩阵的模与条件数**

   考虑一个具体的上三角矩阵 $A \in R^{n\times n}$，其所有对角元都为 1，而所有的上三角部分矩阵元都是 -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) 如果我们采用矩阵 p 模的定义，

$$||A||_p = \sup_{\vec{x}\neq\vec{0}} \frac{||A\vec{x}||_p}{||\vec{x}||_p}, \tag{5}$$

其中等式右边的模函数 $||\cdot||_p$ 是标准定义的矢量 p 模。说明如果取 $p\to\infty$，得到的所谓 ∞ 模为，

$$||A||_\infty = \max_{i=1,\cdots,n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|. \tag{6}$$

(d) 矩阵的模有多种定义方法。一种常用的是 $p=2$ 的欧氏模 $||\cdot||_2$。如果我们有一个幺正矩阵 $U\in C^{n\times n}$，证明 $||U||_2 = ||U^\dagger||_2 = 1$。证明对于任意的 $A\in C^{n\times n}$，$||UA||_2 = ||A||_2$。因此，如果利用欧氏模来定义条件数，$K_2(A) = K_2(UA)$。

(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 个待定的系数 c_i）来近似 f。构建两者之间的差的平方的积分，

$$D = \int_0^1 dx \left(\sum_{i=1}^{n} c_i x^{i-1} - f(x)\right)^2, \tag{7}$$

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

$$\sum_{j=1}^{n} (H_n)_{ij} c_j = b_i, \tag{8}$$

其中 $i,j=1,\cdots,n$。或者简写为矩阵形式：$H_n\cdot c = b$，其中 $c,b\in R^n$，而 $H_n\in R^{n\times n}$ 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) 请证明矩阵 H_n 是对称正定的矩阵，即对于任意的 $c\in R^n$，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 的增加会迅速地减小。事实上，它的行列式竟然有严格的表达式：

$$\begin{cases} \det(H_n) = \frac{c_n^4}{c_{2n}}, \\ c_n = 1!\cdot 2!\cdots(n-1)! \end{cases} \tag{9}$$

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 $\det(H_n)$，$n\geq 10$ 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，分别利用高斯消元法和 Cholesky 分解来求解线性方程 $H_n\cdot x = b$，其中 $b=(1,1,\cdots,1)\in R^n$。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。

4. **级数求和与截断误差**

计算级数与积分的差

$$f(q^2) = \left(\sum_{\vec{n} \in \mathbb{Z}^3} - \mathcal{PV} \int d^3\vec{n} \right) \frac{1}{|\vec{n}|^2 - q^2}, \tag{10}$$

这里 $\mathbb{Z}^3$ 为三维矢量的集合，当 $\vec{n} = (n_1, n_2, n_3) \in \mathbb{Z}^3$ 时，n_1, n_2, n_3 全为整数。$\mathcal{PV}$ 表示取主值积分。

(a) 请求出 $f(q^2)$ 在 $q^2 = 0.5$ 处的值。

(b) 引入截断 Λ 使得 $|\vec{n}| \leq \Lambda$。要使得 $f(q^2 = 0.5)$ 的计算精度达到 10^{-5}，需要 Λ 多大?

(c) 有没有办法改变 $f(q^2)$ 的表达形式，使得计算 $f(q^2)$ 的效率远高于公式 (10) 给出的级数求和的效率。