计算物理学第一次作业

2021 年 10 月 19 日

1 数值误差的避免

(a)

根据题意，我们令

$$\epsilon = \frac{\epsilon_M}{2} \tag{1.1}$$

按照计算机的求和顺序，可以得到

$$\overline{x} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i \tag{1.2}$$

$$\overline{x}' = \frac{1}{N}\left(\left(x_1\left(1+\epsilon\right)+x_2\right)\left(1+\epsilon\right)\cdots+x_N\right)\left(1+\epsilon\right) \tag{1.3}$$

$$= \frac{1}{N}\left[\sum_{i=1}^{N} x_i + \sum_{i=1}^{N} x_i\left(N+1-i\right)\epsilon\right] \tag{1.4}$$

若要估计舍入误差的最大上限，可以设

$$\begin{cases} x_i = x_1 & i = 1, \\ x_i = 0 & i = 2, 3\cdots N \end{cases} \tag{1.5}$$

则最后得到

$$\overline{x}' = \frac{x_1}{N} + \frac{x_1 N\epsilon}{N} \tag{1.6}$$

$$= \overline{x} + \overline{x}N\epsilon \tag{1.7}$$

$$\frac{\overline{x}' - \overline{x}}{\overline{x}} = N\epsilon = N\frac{\epsilon_M}{2} \tag{1.8}$$

(b)

显然，上式中出现大数相减，下式先平方在求和，因此是下式更稳定。

(c)

$$I_0 = \int_0^1 \frac{1}{x+5}\mathrm{d}x = \ln\frac{6}{5} \tag{1.9}$$

$$\begin{aligned} I_k + 5I_{k-1} &= \int_0^1 \frac{x^k + 5x^{k-1}}{x+5}\mathrm{d}x && (1.10) \\ &= \int_0^1 x^{k-1}\mathrm{d}x && (1.11) \\ &= \frac{1}{k} && (1.12) \end{aligned}$$

如果计算时出现微小误差使得

$$I_0' = I_0\left(1+\epsilon\right) \tag{1.13}$$

则最后得到

$$I_n = \left(-5\right)^n I_0\epsilon \tag{1.14}$$

显然不是稳定的

2 矩阵的模与条件数

(a)

$$\det\left(A\right) = \prod_{i=1}^{n} 1 = 1 \neq 0 \tag{2.1}$$

因此是非奇异矩阵。

(b)

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 & 4 & \cdots & 2^{n-2} \\ 0 & 1 & 1 & 2 & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 2 & 4 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{2.2}$$

(c)

做一个不影响最终结果的假设:

$$\max_{i=1,\cdots,n} |x_i| = 1 \tag{2.3}$$

因此

$$\begin{aligned}
&\frac{\max_{i=1,\cdots,n} \left|\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j\right|}{\max_{i=1,\cdots,n} |x_i|} && (2.4)\\
&= \max_{i=1,\cdots,n} \left|\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j\right| && (2.5)\\
&\leqq \max_{i=1,\cdots,n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|\,|x_j| && (2.6)\\
&\leqq \max_{i=1,\cdots,n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| && (2.7)
\end{aligned}$$

当 $|x_i| = 1$ 时,等号成立。证毕

(d)

$$\begin{aligned}
\|U\|_2 &= \frac{\left((Ux)^* Ux\right)^{\frac{1}{2}}}{(x^*x)^{\frac{1}{2}}} && (2.8)\\
&= \frac{(x^*U^*Ux)^{\frac{1}{2}}}{(x^*x)^{\frac{1}{2}}} && (2.9)\\
&= 1 && (2.10)
\end{aligned}$$

同理

$$\|U\|_2 = \|U^{\dagger}\|_2 = 1 \tag{2.11}$$

$$\begin{aligned}
\|UA\|_2 &= \frac{\left((UAx)^* UAx\right)^{\frac{1}{2}}}{(x^*x)^{\frac{1}{2}}} && (2.12)\\
&= \frac{(x^*A^*U^*UAx)^{\frac{1}{2}}}{(x^*x)^{\frac{1}{2}}} && (2.13)\\
&= \frac{(x^*A^*Ax)^{\frac{1}{2}}}{(x^*x)^{\frac{1}{2}}} && (2.14)\\
&= \|A\|_2 && (2.15)
\end{aligned}$$

(e)

$$\|A\|_{\infty} = 1 \tag{2.16}$$

$$\|A^{-1}\|_{\infty} = 2^{n-2} \tag{2.17}$$

$$K_{\infty}(A) = \|A\|_{\infty}\|A^{-1}\|_{\infty} = 2^{n-2} \tag{2.18}$$

3 Hilbert 矩阵

(a)

$$D = \int_0^1 \mathrm{d}x \left(\sum_{j=1}^{n} c_j x^{j-1} - f(x)\right)^2 \tag{3.1}$$

取极值，则有

$$\frac{\partial D}{\partial c_i} = 0 \tag{3.2}$$

$$\int_0^1 \left(\sum_{j=1}^{n} c_j x^{j-1} - f(x)\right) x^{j-1}\mathrm{d}x = 0 \tag{3.3}$$

$$\sum_{j=1}^{n} \int_0^1 c_j x^{i+j-2}\mathrm{d}x = \int_0^1 f(x)\, x^{i-1}\mathrm{d}x \tag{3.4}$$

$$\sum_{j=1}^{n} \frac{c_j}{i+j-1} = \int_0^1 f(x)\, x^{j-1}\mathrm{d}x \tag{3.5}$$

故

$$\begin{cases} (H_n)_{ij} = \frac{1}{i+j-1} \\ b_i = \int_0^1 f(x)\, x^{i-1}\mathrm{d}x \end{cases} \tag{3.6}$$

(b)

由于 $(H_n)_{ij}=\frac{1}{i+j-1}$，对称性是显然的。

$$\int_0^1\left(\sum_{i=0}^{n}c_ix^{i-1}\right)^2\mathrm{d}x \tag{3.7}$$

$$=\int_0^1\sum_{i=0}^{n}c_ix^{i-1}\cdot\sum_{j=0}^{n}c_jx^{j-1}\mathrm{d}x \tag{3.8}$$

$$=\int_0^1\sum_{i=0}^{n}\sum_{j=0}^{n}c_ic_jx^{i+j-2}\mathrm{d}x \tag{3.9}$$

$$=\sum_{i=0}^{n}\sum_{j=0}^{n}\frac{c_ic_j}{i+j-1} \tag{3.10}$$

$$=c^{\mathrm{T}}H_nc \tag{3.11}$$

由于被积函数大于等于 0，因此 $c^{\mathrm{T}}H_nc\geqq 0$。
显然当且仅当 $\sum_{i=0}^{n}c_ix^{i-1}\equiv 0$，即 $c_i=0$ 时成立。

对称实矩阵的所有本征值为实数。由于 H_n 为对称正定实矩阵，因此其本征值均大于 0。故

$$\det\left(H_n\right)=\prod_{i=1}^{s}\lambda^{r_i}\geq 0 \tag{3.12}$$

即 H_n 是非奇异的

(c)

$$\frac{1}{\det\left(H_n\right)}=n!\cdot\sum_{i=1}^{2n-1}\binom{i}{\left[\frac{i}{2}\right]} \tag{3.13}$$

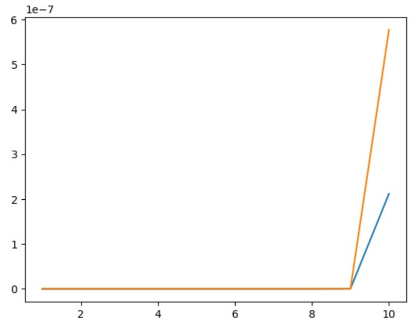
$$\tag{3.14}$$

代入斯特灵公式得到

$$\det\left(H_n\right)=0.645x^{-1/4}(2\pi)^x4^{-x^2} \tag{3.15}$$

(d)

经解得，高斯消元法更精确。如图，也可以运行 3(d).py 查看结果。



4 级数求和与截断误差

(a)

第三小问给出了详细求解过程

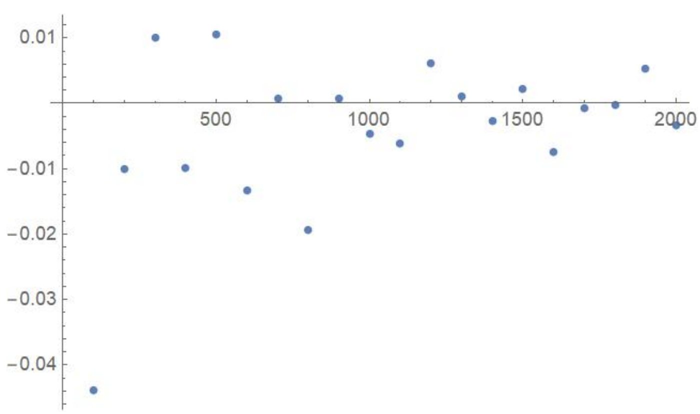
$$f\left(q^2\right)_{q^2=0.5}=1.10622 \tag{4.1}$$

(b)

将这个求和减积分的式子拆分成从 $n\in[0,1)$，$n\in[1,2)...n\in[R,R+1)$
利用程序求出

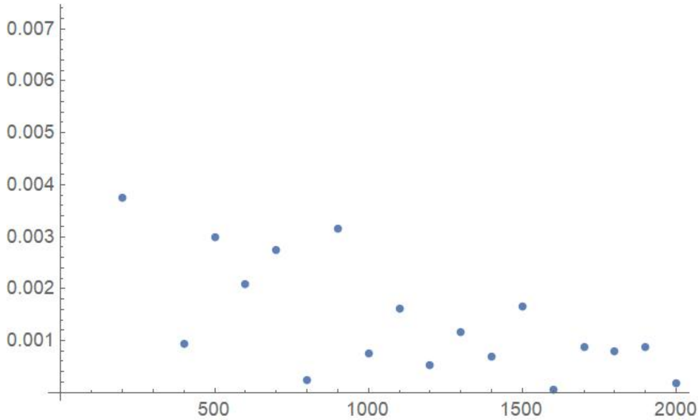
$$g\left(R\right)=\left(\sum_{|\vec{n}|\in[R,R+1)}-\mathcal{PV}\int \mathrm{d}^3n\right)\frac{1}{|\vec{n}|^2-q^2} \tag{4.2}$$

若当 $R>>1$ 且 $\overline{g\left(R\right)}<<|g\left(R\right)|<10^{-5}$，则可以认为精度达到了 10^{-5}。



可以看到即便当 $R=2000$ 时，误差依旧较大。且收敛较慢不便外推。
在此做一个假设，即误差主要受求和项中 $n^2=R^2$ 的影响，因为当 R 截止于不同位置，即 $R+$ 或 $R-$

处，将会造成一个突变。突变项即为当 $n^2 = R^2$ 时求和项的值。
求出该项的值并作图见 4.cpp



可以看到误差与 $1/R$ 为同一量级。保守估计，当 $\Lambda \sim 10^-6$，此时精度能到达 10^{-5}

(c)

为了使求和与积分结果分别能收敛，将式子改写为

$$f\left(q^2, \vec{r}\right) = \sum_{\vec{n}\in\mathbb{Z}^3} \frac{e^{i\vec{n}\cdot\vec{r}}}{|\vec{n}|^2 - q^2} - \text{P.V.} \int \mathrm{d}^3\vec{n} \frac{e^{i\vec{n}\cdot\vec{r}}}{|\vec{n}|^2 - q^2} \tag{4.3}$$

对求和项进行拆分，得到如下两部分

$$\sum_{\vec{n}\in\mathbb{Z}^3} \frac{e^{i\vec{n}\cdot\vec{r}}}{|\vec{n}|^2 - q^2} = \sum_{\vec{n}\in\mathbb{Z}^3} \frac{e^{i\vec{n}\cdot\vec{r}} e^{-\left(|\vec{n}|^2 - q^2\right)}}{|\vec{n}|^2 - q^2} + \sum_{\vec{n}\in\mathbb{Z}^3} \frac{e^{i\vec{n}\cdot\vec{r}}\left(1 - e^{-\left(|\vec{n}|^2 - q^2\right)}\right)}{|\vec{n}|^2 - q^2} \tag{4.4}$$

$$= \sum_{\vec{n}\in\mathbb{Z}^3} \frac{e^{i\vec{n}\cdot\vec{r}} e^{-\left(|\vec{n}|^2 - q^2\right)}}{|\vec{n}|^2 - q^2} + \int_0^1 \mathrm{d}t e^{tq^2} \sum_{\vec{n}\in\mathbb{Z}^3} e^{i\vec{n}\cdot\vec{r} - t|\vec{n}|^2} \tag{4.5}$$

对第二部分运用泊松求和公式

$$\sum_{\vec{n}\in\mathbb{Z}^3} a(\vec{n}) = \sum_{\vec{m}\in\mathbb{Z}^3} \hat{a}(\vec{k}) \tag{4.6}$$

其中 $\hat{a}(\vec{k}) = \int a(\vec{n}) e^{-2\pi i\vec{k}\cdot\vec{n}} \mathrm{d}^3\vec{n}$ 代入 $a(\vec{n}) = e^{i\vec{n}\cdot\vec{r} - t|\vec{n}|^2}$，得到

$$\hat{a}(\vec{k}) = \int \mathrm{d}^3\vec{n} e^{i\vec{n}\cdot\vec{r} - t|\vec{n}|^2} e^{-2\pi i\vec{k}\cdot\vec{n}} = \int \mathrm{d}^3\vec{n} e^{i\vec{n}\cdot(\vec{r} - 2\pi\vec{k}) - t|\vec{n}|^2} \tag{4.7}$$

$$= 2\pi \int_0^\infty \mathrm{d}n n^2 \int_0^\pi \mathrm{d}\theta \sin\theta e^{i|\vec{r} - 2\pi\vec{k}| n\cos\theta - tn^2} \tag{4.8}$$

$$= 2\pi \int_0^\infty \mathrm{d}n \frac{2n\sin(n|\vec{r} - 2\pi\vec{k}|)}{|\vec{r} - 2\pi\vec{k}|} e^{-tn^2} \tag{4.9}$$

$$= \left(\frac{\pi}{t}\right)^{3/2} e^{-\frac{|r - 2\pi k|^2}{4t}} \tag{4.10}$$

可以看到现在的积分内求和收敛的很快。计算出求和项为:

$$\sum_{\vec{n}\in\mathbb{Z}^3}\frac{e^{i\vec{n}\cdot\vec{r}}}{|\vec{n}|^2-q^2}=\sum_{\vec{n}\in\mathbb{Z}^3}\frac{e^{i\vec{n}\cdot\vec{r}}e^{-\left(|\vec{n}|^2-q^2\right)}}{|\vec{n}|^2-q^2}+\int_0^1\mathrm{d}te^{tq^2}\sum_{\vec{k}\in\mathbb{Z}^3}\left(\frac{\pi}{t}\right)^{3/2}e^{-\frac{|\tau-2\pi k|^2}{4t}} \tag{4.11}$$

$$=\sum_{\vec{n}\in\mathbb{Z}^3}\frac{e^{i\vec{n}\cdot\vec{r}}e^{-\left(|\vec{n}|^2-q^2\right)}}{|\vec{n}|^2-q^2}+\sum_{\vec{k}\in\mathbb{Z}^3}\int_0^1\mathrm{d}te^{tq^2}\left(\frac{\pi}{t}\right)^{3/2}e^{-\frac{|\tau-2\pi k|^2}{4t}} \tag{4.12}$$

当 $k=0$ 且 $\vec{r}\to 0$ 时积分会发散，实际上刚好能与积分项相消。写出积分项在球坐标中的表达式

$$\mathrm{P.V.}\int\mathrm{d}^3\vec{n}\frac{e^{i\vec{n}\cdot\vec{r}}}{|\vec{n}|^2-q^2}=2\pi\mathrm{P.V.}\int_0^\infty\mathrm{d}nn^2\int_0^\pi\mathrm{d}\theta\sin\theta\frac{e^{inr\cos\theta}}{n^2-q^2} \tag{4.13}$$

$$=\frac{4\pi}{r}\mathrm{P.V.}\int_0^\infty\mathrm{d}n\frac{n\sin(nr)}{n^2-q^2} \tag{4.14}$$

$$=\frac{2\pi}{r}\,\mathrm{Im}\,\mathrm{P.V.}\int_{-\infty}^\infty\mathrm{d}n\frac{ne^{inr}}{n^2-q^2} \tag{4.15}$$

$$=\frac{2\pi^2}{r}\cos(qr) \tag{4.16}$$

由于最终 $\vec{r}\to 0$，可以令

$$\frac{2\pi^2}{r}\cos(qr)=\frac{2\pi^2}{r} \tag{4.17}$$

$$=\int_0^\infty\mathrm{d}t\left(\frac{\pi}{t}\right)^{3/2}e^{-\frac{|\vec{r}-2\pi k|^2}{t}}\bigg|_{\vec{k}=0} \tag{4.18}$$

最后求得

$$f\left(q^2\right)=\sum_{n\in\mathbb{Z}^3}\frac{e^{-\left(|\vec{n}|^2-q^2\right)}}{|\vec{n}|^2-q^2}+\int_0^1\mathrm{d}te^{tq^2}\sum_{\substack{n\in\mathbb{Z}^3\\ n\neq 0}}\left(\frac{\pi}{t}\right)^{3/2}e^{-\frac{\pi^2|\vec{n}|^2}{t}}-2\pi^{3/2}e^{q^2}+2\pi^2q\,\mathrm{erfi}\left(q\right) \tag{4.19}$$

代入计算机见 4.py ，得到

$$f\left(q^2\right)=1.10622 \tag{4.20}$$