计算物理作业 4

作业说明

1. 本次作业截至时间为 2025 年 12 月 27 日 18:00, 迟交作业将只能获得本次作业分数的 90%。每人都有一次迟交作业且不影响成绩的机会, 但该次迟交必须在规定截至时间的 48h 内。病假等特殊情况需要在截至日期之前向助教说明。

2. 作业相关的所有文件请打包到一个压缩文件后发送到课程邮箱 `com_phy2025@163.com`, 压缩包的文件名和邮件题目请取为“学号 _ 姓名 _hw4”(例如“2300000000_ 张三 _hw4”)。

3. 请提交一个 PDF 格式的作业解答, 其中可以描述解题步骤, 程序运行的结果, 必要的图表等。

4. 请提交程序的源文件 (格式: `python/fortran/c/c++`), 并提交一个说明文档 (任意可读格式), 主要说明代码的大致思路、输入输出格式等。请确保代码能够顺利编译, 且运行后能得到你提供的解答中的结果。

5. 作业严禁抄袭, 助教可能抽取部分同学当面说明解题思路和细节。

1. 计算矩阵本征值

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，请输出第 5, 10, 15, $\cdots$次迭代后的矩阵 T_k。

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：

$$x_i'' - (x_{i-1} + x_{i+1} - 2x_i) = 0, \quad i = 1, 2, \cdots, N \tag{2}$$

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 $x_{i+N}(t) = x_i(t)$。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：

$$x'' = -Ax \tag{3}$$

其中 A 是一个矩阵，其矩阵元

$$-A_{ij} = \delta_{i-1,j} + \delta_{i+1,j} - 2\delta_{i,j} \tag{4}$$

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

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

(b) 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，

$$\begin{aligned} z^{(k)} &= Aq^{(k-1)} \\ q^{(k)} &= \frac{z^{(k)}}{||z^{(k)}||} \\ v^{(k)} &= [q^{(k)}]^\dagger A q^{(k)} \end{aligned} \tag{5}$$

其中 $||z^{(k)}||$ 为欧氏模，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，$\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_N$。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：

$$\lim_{k\to\infty} v^{(k)} = \lambda_1 \lim_{k\to\infty} q^{(k)} = v_1 \tag{6}$$

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. 孤立子数值解

参考课件《偏微分方程 A》，对 Kruskal, Zalusky 孤立子问题, 给出数值解（随时间演化的动画示意图，请使用常用格式，如 mp4，gif 等）及说明，注意保证大 t 时数值结果的稳定性。

$$\begin{cases} u_t + uu_x + \delta^2 u_{xxx} = 0, \quad \delta = 0.022 \\ u(x,0) = \cos(\pi x), \quad 0 \leqslant x \leqslant 2 \end{cases} \tag{7}$$

4. 二维波动方程

考虑由以下初始条件和边界条件给出的振动方膜的二维波动方程:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \dfrac{\partial^2 u}{\partial^2 t}, \quad x, y \in [0,1], t \geqslant 0 \\ u(x,y,0) = \sin(\pi x)\sin(2\pi y) \\ u = 0|_{\partial\Omega}, \quad t \geqslant 0 \\ \left.\dfrac{\partial u}{\partial t}\right|_{t=0} = 0, \quad x, y \in (0,1) \end{cases} \tag{8}$$

其中 Ω 表示求解区域，$\partial\Omega$ 表示求解区域的边界。

(a) 使用分离变量法给出该方程的解析解。

(b) 使用二维差分网格，写出求解该方程的显式求解的算法，并编写数值求解离散波动方程的程序。特别是描述如何处理边界条件和初始条件，并将结果与解析解进行比较。画图显示 $t = 0, 1, 2$ 时刻方程的解。

(c) 给出不同差分步长（Δt , Δx 及 Δy）情形的数值表现，特别是考虑和校验数值稳定性条件（此处可以设置 $\lambda = 1, 2$ 等不同值）：

$$\Delta t \leqslant \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \left(\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} \right)^{-1/2} \tag{9}$$

(d) 对 $\Delta x = \Delta y$ 情形，给出结果的动画展示。

5. 随机数产生器

参考课件《随机数及简明概率论》，选取某种程序自带的随机数产生方法，产生一组（1000 个）$[0, 1]$ 之间均匀分布的随机数，统计 $0 \sim 0.1, 0.1 \sim 0.2, \cdots, 0.9 \sim 1$ 各个区间的撒点数。重复上述步骤多次（如：10000 次）

(a) 请数值模拟，得到落入区间如 $[0.6, 0.7]$ 内的随机数的比例，给出这个比例的 10000 次数值模拟的分布曲线，并给予论述说明；。

(b) 参照课件，构建 Chi2 检验随机数的性质，并论述结果。

(c) 实现下面的随机数算法 (16807 产生器)[对每一个 $x(n)$, 在使用前进行操作，即 $x(n)/m$]，确保随机数在 $[0, 1]$ 范围）。*Given a random integer $x(n)$, the next random integer in a random sequence is given by computing $x(n+1) = [ax(n)(\mod m)]$, where $a = 7^5 = 16807$ and $m = 2^{31}-1 = 2147483647$; as a check on your implementation, if $x(0) = 1$, then $x(10000) = 1043618065$.*