计算物理作业1

作业说明：

a. 完成所有题目，作业提交截止时间为 2023 年 10 月 21 日 18:00。迟交作业将只能取得本次作业所得分数的 90%。每人有一次迟交作业且不影响成绩的机会，且该次迟交须在规定截止时间的 48 小时内。病假等其他向助教在截止时间前说明的特殊情况除外。

b. 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。

c. 请提交程序的源文件 （格式：python/fortran/c,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、运行、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。

d. 本次作业相关的所有文件打包到一个压缩文件后发送到课程的公邮， 地址为 com_phy2023@163.com。压缩包的文件名和邮件题目请取为“学号-姓名-hw1” （例如210000000-张三-hw1）。

e. 作业严禁抄袭，助教会抽查部分同学当面对作业内容进行提问。

1. 数值误差的避免(15pt)

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：

(a) 直接展开法(5pt)

$$e^{-x} = \sum_{0}^{\infty} \frac{(-1)^n \, x^n}{n!}$$

(b) 递归法(5pt)

$$e^{-x} = \sum_{0}^{\infty} s_n = \sum_{0}^{\infty} \frac{(-1)^n x^n}{n!}$$

$$s_n = -s_{n-1} \frac{x}{n}$$

(c) 先利用（2）计算 e^{x}，然后求倒数。(5pt)

2. 矩阵的模与条件数 (25pt)

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。(5pt)

(b) 给出矩阵的逆矩阵 A^{-1} 的形式。 (5pt)

(c) 如果我们采用矩阵p模的定义，(5pt)

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

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，

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

(d) 矩阵的模有多种定义方法。一种常用的是 $p = 2$ 的欧氏模 $||\cdot||_2$。我们有一个幺正矩阵 $U \in \mathbb{C}^{n\times n}$ ，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，如果利用欧氏模来定义条件数，$K_2(A) = K_2(UA)$。 (5pt)

(e) 利用这个定义计算上面给出的具体的矩阵的条件数 $K_\infty(A) = ||A||_\infty ||A^{-1}||_\infty$。(5pt)

3. Hilbert 矩阵（30pt）

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 $f(x)$。构建两者之间的差的平方的积分，

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

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

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

其中 $i,j = 1,\cdots,n$。或者简写为矩阵形式：$H_n \cdot c = b$，其中 $c,b \in \mathbb{R}^n$，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)。 (5pt)

(b) 请证明矩阵 H_n 是对称正定的矩阵，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。(10pt)

(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：

$$\begin{cases} \det(H_n) = \dfrac{c_n^4}{c_{2n}} \\ c_n = 1! \times 2! \ldots \times (n-1)! \end{cases}$$

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)。(5pt)

(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 $b = (1,1,\cdots,1)^T \in \mathbb{R}^n$。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。(10pt)

4.矩阵与二次型（15pt）

（a）已知矩阵B的形式为

$$B=\begin{bmatrix}1 & -1 & 0\\ -1 & 2 & -1\\ 0 & -1 & 1\end{bmatrix}$$

求解矩阵的特征值和特征向量（5pt）

（b）将矩阵B进行对角化，$B=Q\Sigma Q^T$，其中$Q^{-1}=Q^T$，写出矩阵Q，Σ。对二次型$\frac{1}{2}u^TBu=1$进行作图，画出矩阵B的三个特征向量的方向。（10pt）

5 正定矩阵(15pt)

对称矩阵 K 如果满足对于任意非零向量 u 都有 $u^TKu > 0$，就被称为“正定”矩阵。

(a) 我们根据矩阵

$$A=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ -1 & 1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 1 & 0\\ 0 & 0 & -1 & 1\\ 0 & 0 & 0 & -1\end{bmatrix}$$

构造

$$K_4=A^TA=\begin{bmatrix}2 & -1 & 0 & 0\\ -1 & 2 & -1 & 0\\ 0 & -1 & 2 & -1\\ 0 & 0 & -1 & 2\end{bmatrix}$$

请证明对于每一个非零向量u，都有$u^TK_4u=u^TA^TAu>0$ 。请先说明为什么$u^TA^TAu\geq 0$，然后说明只能取大于号。（7pt）

（b）对于哪些 b 的取值，这个矩阵S是正定的？对于哪些 b，它是半正定的？它的主元是什么？（8pt）

$$S=\begin{bmatrix}2 & b\\ b & 4\end{bmatrix}$$