计算物理作业 4

作业说明：

a. 完成所有题目，作业提交截止时间为 **2023 年 12 月 16 日 23:59**。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-hw4"（例如 210000000-张三-hw4）。

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. 最速下降法和共轭梯度法(20pt)

编写最速下降和共轭梯度算法，求解

$$
\begin{aligned}
0.05x_1 + 0.07x_2 + 0.06x_3 + 0.05x_4 &= 0.23 \\
0.07x_1 + 0.10x_2 + 0.08x_3 + 0.07x_4 &= 0.32 \\
0.06x_1 + 0.08x_2 + 0.10x_3 + 0.09x_4 &= 0.33 \\
0.05x_1 + 0.07x_2 + 0.09x_3 + 0.10x_4 &= 0.31
\end{aligned}
$$

2. 求解矩阵本征值(30pt)

利用 QR 算法、Jacobi 算法、Sturm 序列+对分法，求下列矩阵的本征值

$$
T = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 4 \end{pmatrix}
$$

对于 QR 算法和 Jacobi 算法，请写出第 5,10,15,20,· · · 次迭代后的矩阵 T_k。对于 Sturm 序列 + 对分法请写出第 5,10,15,20,· · · 次迭代后本征值的近似值。

3. 幂次法求矩阵最大模的本征值和本征矢(30pt)

本题中我们考虑利用幂次法 (power method) 来求一个矩阵 $A \in R^{n\times n}$ 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：

$$
x_i'' - [x_{i-1} + x_{i+1} - 2x_i] = 0, \quad i = 1,2,\dots,N
$$

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 $x_{i+N}(t) \equiv x_i(t)$。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，

$$x'' = -A\, x$$

其中 A 是一个矩阵，其矩阵元为

$$(-A_{ij}) = \delta_{i-1,j} + \delta_{i+1,j} - 2\delta_{i,j}$$

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

(a) 考虑一个一维的原子链的经典振动解，尝试 $x(t) = xe^{-i\omega t}$，说明振幅 $x \in C^n$ 满足本 征方程：$A \cdot x = \lambda x$，本征值 $\lambda = \omega^2$。(10pt)

(b) 是的，这个题目可以轻易地解析求解。但现在我们假装不知道这点。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 ω_{max}^2。这对应于最大的 λ。

【幂次法】：我们从任意一个单位矢量 $q^{(0)} \in C^N$ 出发，我们从 $k = 1, 2, \cdots$ 开始构造迭代，

$$z^{(k)} = Aq^{(k-1)}$$

$$q^{(k)} = \frac{z^{(k)}}{||z^{(k)}||}$$

$$v^{(k)} = [q^{(k)}]^{\dagger} \mathrm{A} \mathrm{q}^{(\mathrm{k})}$$

其中$||z^{(k)}||$为欧式摸，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，$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_N$。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：

$$\lim_{k\to\infty} v^{(k)} = \lambda_1$$

$$\lim_{k\to\infty} q^{(k)} = v_1$$

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。(20pt)

4. 常微分方程(20pt)

参考课件“常微分方程”中的“洛伦兹吸引子”, 重复结果, 并额外给出至少 2 组不同 的 β, ρ, σ 的结果

$$\begin{bmatrix} y_1' \\ y_2' \\ y_3' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\beta & 0 & y_2 \\ 0 & -\sigma & \sigma \\ -y_2 & \rho & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathrm{y}_1 \\ \mathrm{y}_2 \\ \mathrm{y}_3 \end{bmatrix}$$