1.两种方法解线性方程组

利用最速下降、共轭梯度求极值算法来求解线性方程组，只需将$A\vec{x}=\vec{b}$化为求极值问题$\min_x \frac{1}{2}x^TAx-b^Tx$即可。

编写程序 `1.c` 实现，得到结果：

```
D:\PKU\notes\Computational Physics\homework-4>1.exe
0.999993 1.000004 1.000002 0.999999
1.000000 1.000000 1.000000 1.000000
```

其中上面是最速下降法的结果，下面是共轭梯度法得到的结果。

2. 四种方法求本征值

利用QR算法、Jacobi算法、Sturm序列+对分法，求解下列矩阵本征值；

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

对于QR算法和Jacobi算法，写出第$5k$次迭代后的矩阵T_k；

QR

count=5

$$\begin{pmatrix} 4.29277 & -0.72131 & -0.00000 & -0.00000 \\ -0.72131 & 3.55611 & -0.33497 & 0.00000 \\ 0.00000 & -0.33497 & 1.89640 & -0.00040 \\ 0.00000 & 0.00000 & -0.00040 & 0.25472 \end{pmatrix}$$

count=10

$$\begin{pmatrix} 4.73418 & -0.13145 & -0.00000 & -0.00000 \\ -0.13145 & 3.18813 & -0.01858 & 0.00000 \\ 0.00000 & -0.01858 & 1.82297 & -0.00000 \\ 0.00000 & 0.00000 & -0.00000 & 0.25472 \end{pmatrix}$$

count=15

$$\begin{pmatrix} 4.74508 & -0.01781 & -0.00000 & -0.00000 \\ -0.01781 & 3.17748 & -0.00115 & -0.00000 \\ 0.00000 & -0.00115 & 1.82272 & -0.00000 \\ 0.00000 & 0.00000 & -0.00000 & 0.25472 \end{pmatrix}$$

count=20

Jacobi

count = 5

$$\begin{pmatrix} 0.35309 & -0.02905 & -0.17934 & 0.20693 \\ -0.02905 & 3.00073 & -0.03548 & -0.00000 \\ -0.17934 & -0.03548 & 1.99745 & 0.11881 \\ 0.20693 & 0.00000 & 0.11881 & 4.64873 \end{pmatrix}$$

count = 10

$$\begin{pmatrix} 0.32234 & 0.00003 & -0.00088 & 0.01198 \\ 0.00003 & 3.00214 & 0.00000 & -0.00282 \\ -0.00088 & -0.00000 & 2.01245 & -0.00009 \\ 0.01198 & -0.00282 & -0.00009 & 4.66307 \end{pmatrix}$$

count = 15

$$\begin{pmatrix} 0.32231 & -0.00000 & -0.00000 & -0.00000 \\ -0.00000 & 3.00214 & -0.00000 & 0.00000 \\ -0.00000 & -0.00000 & 2.01245 & -0.00000 \\ -0.00000 & 0.00000 & -0.00000 & 4.66311 \end{pmatrix}$$

count = 20

$$\begin{pmatrix} 4.74528 & -0.00240 & -0.00000 & -0.00000 \\ -0.00240 & 3.17729 & -0.00007 & -0.00000 \\ 0.00000 & -0.00007 & 1.82272 & -0.00000 \\ 0.00000 & 0.00000 & -0.00000 & 0.25472 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0.32231 & 0.00000 & -0.00000 & 0.00000 \\ 0.00000 & 3.00214 & -0.00000 & -0.00000 \\ -0.00000 & -0.00000 & 2.01245 & 0.00000 \\ -0.00000 & 0.00000 & -0.00000 & 4.66311 \end{pmatrix}$$

对Sturm序列+对分法，需要根据主对角线和副对角线上的序列递归定义函数，但C语言无法进行函数式编程。因此改用python，编写程序math_.py和T2.py，运行得到圆盘定理确定的本征值范围，以及第 $5k$ 次迭代后的特征值：

```
D:\PKU\notes\Computational Physics\homework-4>python math.py
本征值范围:
lowerbound: 0,upperbound: 5
5 iters approximate:0.15625
10 iters approximate:0.2587890625
15 iters approximate:0.254669189453125
20 iters approximate:0.25472164154052734
taget 1: res=0.25472164154052734
5 iters approximate:1.71875
10 iters approximate:1.8212890625
15 iters approximate:1.822662353515625
20 iters approximate:1.8227148056030273
taget 2: res=1.8227148056030273
5 iters approximate:3.28125
10 iters approximate:3.1787109375
15 iters approximate:3.177337646484375
20 iters approximate:3.1772851943969727
taget 3: res=3.1772851943969727
5 iters approximate:4.84375
10 iters approximate:4.7412109375
15 iters approximate:4.745330810546875
20 iters approximate:4.745278358459473
taget 4: res=4.745278358459473
```

3.幂次法求矩阵最大模的本征值和本征矢

(a)

设解具有形式$x(t) = \vec{x}e^{-i\omega t}$，代入方程$\ddot{\vec{x}} = -A\vec{x}$：

$$-\omega^2\vec{x} = A\vec{x}$$
$$\lambda = -\omega^2$$

由于A的本征矢量$\{v_1, \cdots, v_N\}$构成正交归一完备基矢量，则初始的$q^{(0)}$可以按照这组本征矢展开：

$$q^{(0)} = \sum_{i=1}^{N} a_i^{(0)} v_i$$

其中假设$q^{(0)}$在v_1方向上的overlap不为零，即$a_1^{(0)} \neq 0$
下面证明按照幂次法迭代，可以得到绝对值最大的本征值和对应本征矢：

证明

设norm为归一化操作，则

$$\begin{aligned} q^{(k)} &= \text{norm}(A^n q^{(0)}) \\ &= \text{norm}(\textstyle\sum_i a_i^{(0)} \lambda_i^k \vec{v}_i) \end{aligned}$$

由于$|\lambda_1| > |\lambda_2| \cdots > |\lambda_N|$，当$k \to \infty$时有

$$\lim_{k\to\infty} \left(\frac{|\lambda_i|}{|\lambda_1|}\right)^k = 0, \forall k \geq 2$$

因此经过归一化、取极限后，有

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

于是

$$\lim_{k\to\infty} \nu^{(k)} = \lim_{k\to\infty} [q^{(k)}]^\dagger A q^{(k)} = \lambda_1$$

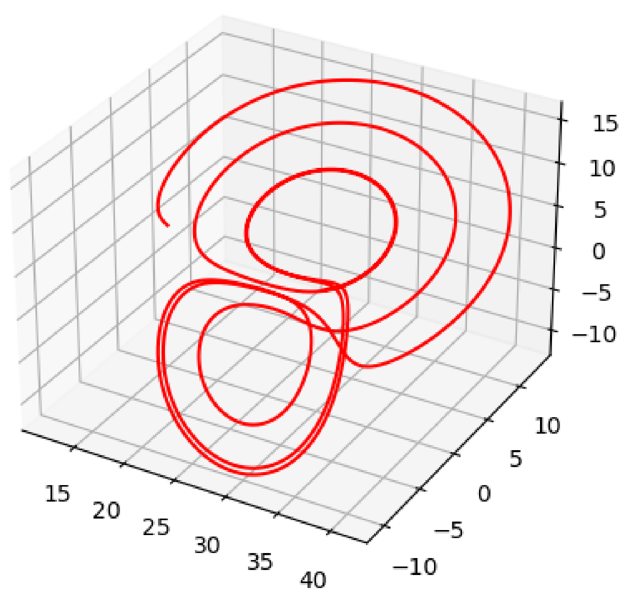
得证

编写程序求解$N = 10$的情形，求出$(-A)$绝对值最大的本征值和相应本征矢（迭代次数为400）：

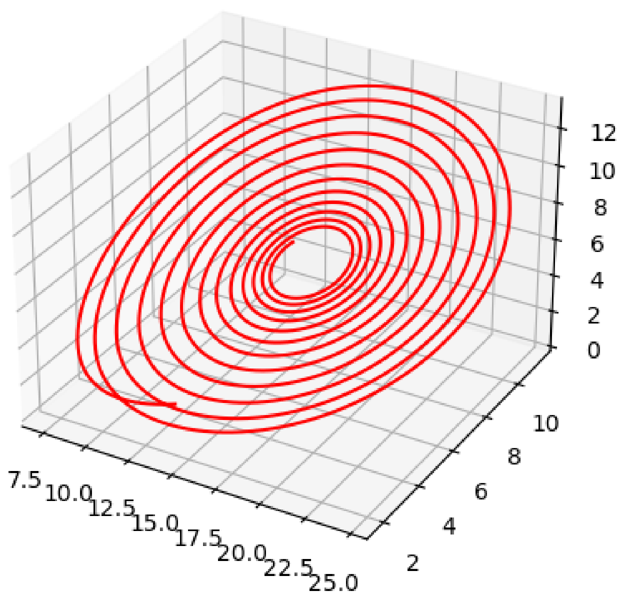
```
D:\PKU\notes\Computational Physics\homework-4>T3.exe
eigenvalue:-4.000000
eigenvector:
-0.316228
0.316228
-0.316228
0.316228
-0.316228
0.316228
-0.316228
0.316228
-0.316228
0.316228
```

4.洛伦兹吸引子

$\beta = 0.67, \rho = 28.00, \sigma = 10.00$:



$\beta = 2.67, \rho = 18, \sigma = 10$:



$\beta = 2.67, \rho = 28, \sigma = 10$: