第四次作业解答

郭凯一 2000011307

22/11/28

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

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

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

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

count = 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

$$\begin{pmatrix} 4.74528 & -0.00240 & -0.00000 & -0.00000 \\ -0.00240 & 3.17729 & -0.00007 & -0.00000 \\ 0.00000 & -0.00007 & 1.82272 & -0.00000 \\ 0.00000 & 0.00000 & -0.00000 & 0.25472 \end{pmatrix}$$

count = 20

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

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$\ddot{\vec{x}}=-A\vec{x}$:

$$
\begin{gathered}
-\omega^2\vec{x}=A\vec{x} \\
A\vec{x}=\omega^2\vec{x}, \qquad \lambda=\omega^2
\end{gathered}
$$

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

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

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

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

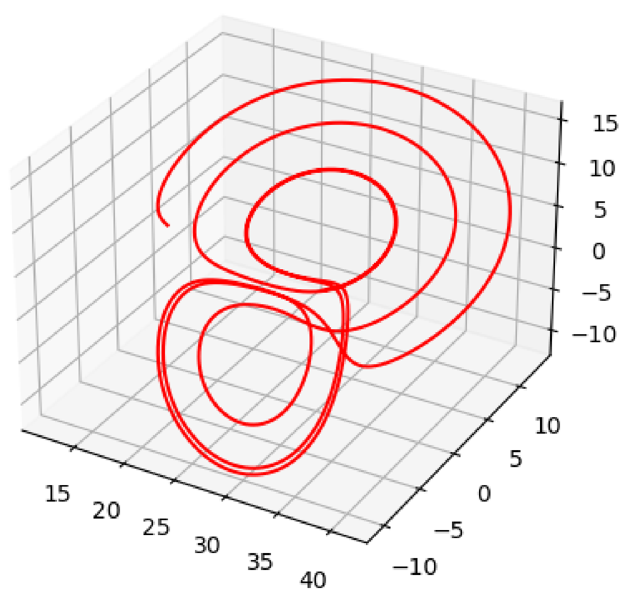
得证

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）：

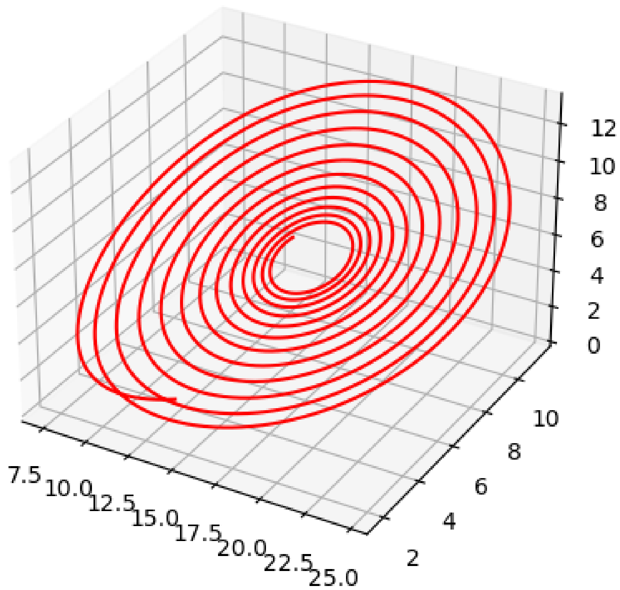
```
D:\PKU\notes\Computational Physics\homework-4>T3.exe
eigenvalue:-4.000000
eigenvector:
-0.316228
0.316228
-0.316228
0.316228
-0.316228
0.316228
-0.316228
0.316228
-0.316228
0.316228
```

4.洛伦兹吸引子

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



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



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