1.三种方法计算 e^{-x}

直接计算

这种方法的稳定性最差。可以预料, 当x,n不断增大时, x^n 与n!会溢出

递归法

计算方式为 $s_n=s_{n-1}\times (-1)x/n,\quad s_0=1$, 于是

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

中间项 s_n 的变化规律是: s_n 的符号不断震荡,其绝对值在n < x时递增,n > x时递减并趋向0. 设我们取前n+1项 $T_n = \sum_{k=0}^n s_k$ 作为 e^{-x} 的一个估计,则根据taylor展开的余项公式,有

$$T=T_n+f^{(n+1)}(\xi)rac{(-1)^{n+1}x^{n+1}}{(n+1)!}\quad (\xi\in(0,x))$$

可以看到, T_n 中每一项都是正负交错的,这导致级数的收敛很慢。 考察余项:

$$|e^{-x}-T_n|=rac{e^{-\xi}x^{n+1}}{(n+1)!}<rac{x^{n+1}}{(n+1)!}\stackrel{n>>1}{\sim}(rac{ex}{n})^n$$

其中用到了Stirling公式: $n! \sim n^n e^{-n} \sqrt{2\pi n}$ 。

当x < n/e时ex/n < 1,此时估计值更接近。

从实际计算结果中来看,maxn=100,x<100/e=36.78 但x从大约17开始就与真值之间有很大偏差了。这是因为n小时,各个 s_n 都比较大,它们相减造成有效数字位数降低。

取逆法

先按递归法计算 e^x ,再计算其倒数。

由于不存在大数相减和溢出的情况,这样计算得到的值精度最高。

2.矩阵的模和条件数

2.1 A的行列式与奇异性

$$\det(A) = 1 \neq 0$$

故A不是奇异矩阵。

2.2 A的逆矩阵形式

设

$$J = egin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \ dots & dots & dots & \ddots & 1 \ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$
 $J^n = 0$

A可以写作:

$$A = I - J - \dots - J^{n-1}$$

设 $A^{-1} = I + \sum_{k=1}^{n-1} c_k J^k$

$$A^{-1}A = \left(I + \sum_{k=1}^{n-1} c_k J^k\right) \left(I - \sum_{k=1}^{n-1} J^k\right) \tag{1}$$

$$=I+\sum_{l=1}^{n-1}(c_l-1-\sum_{k'=1}^{l-1}c_{l-k'})J^l \tag{2}$$

选取各个 c_k 使得 J^l 系数为0:

$$c_l = 1 + \sum_{k=1}^{l-1} c_k$$

递推得到 $c_l=2^{l-1}$ 从而

$$A^{-1} = I + \sum_{k=1}^{n-1} 2^{k-1} J^k$$

2.3 A的∞-模

$$egin{aligned} ||A||_p &= \sup_{||ec{x}||_p = 1} \left| \left(ec{a}_1 \quad ec{a}_2 \quad \cdots ec{a}_n
ight) \left(egin{aligned} x_1 \ x_2 \ dots \ x_n \end{matrix}
ight)
ight|
ight|_p \ &= \sup_{||ec{x}||_p = 1} ||\sum_j ec{a}_j x_j||_p \ &\leq \sup_{||ec{x}||_p = 1} \sum_j ||ec{a}_j||_p x_j \
ight|
angle
ight|
ight|
ight|
ight|
ight|
ight|
ight|
ight|
ig$$

取各个 $x_i = \pm 1$ $j = 1, 2, \dots,$ 则无穷模可以取得其最大值:

$$||Aec{x}||_{\infty} = \max_i \left|\sum_j a_{ij} x_j
ight| = \max_i \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$$

2.4

幺正矩阵是保持态矢量的内积不变的矩阵:

$$\langle \psi | \psi
angle = \langle \psi | \, U^\dagger U \, | \psi
angle$$

$$egin{aligned} ||U||_2 &= \sup_{|\psi
angle
eq 0} rac{||U||\psi
angle\,||_2}{||\,|\psi
angle\,||_2} \ &= \sup_{|\psi
angle = 1} ra{\psi}\,U^\dagger U\,|\psi
angle \end{aligned}$$

矩阵的2-模服从乘法,故有

$$||UA||_2 = ||U||_2||A||_2 = ||A||_2$$

2.5

由上面计算结果知,

$$||A||_{\infty} = n, ||A^{-1}||_{\infty} = 2^{n-1} \ K_{\infty}(A) = n imes 2^{n-1}$$

3.Hilbert矩阵

3.1

$$D(c_1, c_2, \cdots, c_n) = \int_0^1 dx \left(\sum_{i=1}^n c_i x^{i-1} - f(x)
ight)^2$$

对各个参量 c_i 求偏导数,得到方程:

$$egin{split} rac{\partial D}{\partial c_i} &= \int_0^1 dx \cdot 2 \left(\sum_{i=1}^n c_i x^{i-1} - f(x)
ight) x^{i-1} = 0 \ &\int_0^1 x^{i-1} f(x) dx = \sum_{j=1}^n c_j rac{1}{i+j-1} \end{split}$$

得到各个系数:

$$\left\{egin{aligned} (H_n)_{ij} &= rac{1}{i+j-1} \ b_i &= \int_0^1 x^{i-1} f(x) dx \end{aligned}
ight.$$

3.2

令 $c_i = x^{i-1}$,代入:

$$g(x)=\equiv (1 \quad x \quad \cdots \quad x^{n-1})H_n egin{pmatrix} 1 \ x \ dots \ x^{n-1} \end{pmatrix} = \sum_{k=2}^{2n} c_k rac{x^{k-2}}{k-1}$$

其中

$$c_k = egin{cases} k-1, & k \leq n+1 \ 2n-k+1, & k \geq n+1 \end{cases} \ f(x) = xg(x) \ f'(x) = rac{(x^n-1)^2}{(x-1)^2} > 0 \end{cases}$$

当
$$x>0, f(x)>f(0)=0\Rightarrow f(x)\geq 0$$
所以

3.3

$$\ln \det(H_n) = 4 \ln c_n - \ln c_{2n}$$

$$= 4 \sum_{i=1}^{n-1} \ln i! - \sum_{i=1}^{2n} \ln i!$$

对 c_n 在n >> 1情形下取近似:

$$\ln c_n = \sum_{i=1}^{n-1} i! = \sum_{i=1}^{n-1} (i \ln i - i) pprox \int_1^n x \ln x dx - n(n-1)/2$$

积分可以算出:

$$\int x \ln x dx = rac{1}{4} x^2 (2 \ln x - 1)$$

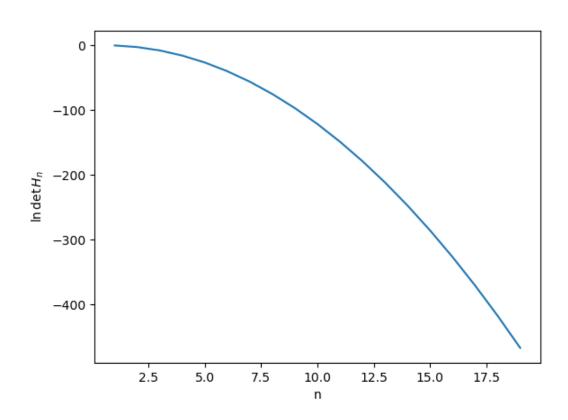
所以有:

$$4 \ln c_n - \ln c_{2n} pprox -2n^2 \ln 2 + C \ \ln \det H_n \sim -n^2 \ln 4 + C$$

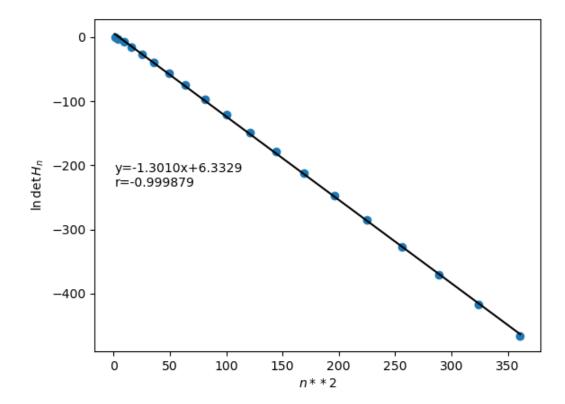
实际计算的结果如下:

n	$\ln \det(H_n)$
1	0.0
2	-2.4849066497880004
3	-7.67786350067821
4	-15.615238196841508
5	-26.309453258276445
6	-39.76620670609766
7	-55.988580206842556
8	-74.97842732916047

n	$\ln \det(H_n)$
9	-96.736949274397
10	-121.26496874930368



拟合得到:



可见近似效果比较理想。

3.4

为了实现计算,我们编写程序matrixCalc.py,实现矩阵类与基本的乘法、转置、上三角矩阵、下三角矩阵的反代,高斯消元、Cholesky分解等操作。可以运行T3.py来用Cholesky分解与GEM两种方法求解前10阶Hilbert矩阵在特定情形下的解。

```
问题
            终端
                   JUPYTER
                           注释
                                  调试控制台
GEM sol 9:218789.27994628725
Cholesky sol 1:-9.997668234803768
Cholesky sol 2:989.7983719614995
Cholesky sol 3:-23755.70340866239
Cholesky sol 4:240200.9288274541
Cholesky sol 5:-1261073.6092823984
Cholesky sol 6:3783267.5764416014
Cholesky sol 7:-6725879.256791485
Cholesky sol 8:7000467.5376583515
Cholesky sol 9:-3937793.4846944376
Cholesky sol 10:923686.2089171143
GEM sol 1:-9.99726592260788
GEM sol 2:989.7630367370259
GEM sol 3:-23754.9411215222
GEM sol 4:240193.92766718712
GEM sol 5:-1261039.9343178642
GEM sol 6:3783174.355768353
GEM sol 7:-6725725.404387591
GEM sol 8:7000318.103178086
GEM sol 9:-3937714.6884527057
GEM sol 10:923668.8139455386
(base) d:\PKU\notes\Computational Physics\homework-1>
```

可以看到,由于Hilbert矩阵的条件数非常大,得到的解稳定性很差。但GEM与Cholesky得到的结果相差不大。

4.级数求和与截断误差

a.题目分析

$$f(q^2) = \left(\sum_{ec{n} \in \mathbb{Z}^3} - \int d^3ec{n}
ight) rac{1}{|ec{n}|^2 - q^2}$$

所求的 $f(q^2)$ 是一个无穷求和减去无穷积分的形式,其中对离散格点的求和是对积分的一个近似。二者的渐进行为在最高阶是相同的,很容易估计:

$$\int d^3ec{n} rac{1}{|ec{n}|^2-q^2} = \lim_{\Lambda o\infty} \int^\Lambda rac{4\pi r^2}{r^2-q^2} dr \ pprox \lim_{\Lambda o\infty} \int^\Lambda 4\pi dr \sim 4\pi \Lambda$$

可以看到,求和或积分都是发散的,二者相减才能出现有限值。因此,为了计算求和,我们需要估计关于 Λ^{-1} 的零

阶和更高阶的项的系数。此外,关于r=q处的奇点,我们只要取积分的主值即可收敛,因此无需担心。 定义

$$g(\vec{r}_0, \Delta) \equiv \int_{x_0 - \frac{\Delta}{x}}^{x_0 + \frac{\Delta}{2}} \int_{y_0 - \frac{\Delta}{x}}^{y_0 + \frac{\Delta}{2}} \int_{z_0 - \frac{\Delta}{x}}^{z_0 + \frac{\Delta}{2}} \frac{1}{x^2 + y^2 + z^2 - q^2} dx dy dz$$
 (3)

$$= \iiint f(\vec{r})d^3\vec{r} \tag{4}$$

$$f(\vec{r}) \equiv f(\vec{r}_0) + (r_i - r_{0i}) \frac{\partial f}{\partial r_i}(\vec{r}_0) + \frac{1}{2!} (r_i - r_{0i}) (r_j - r_{0j}) \partial_i \partial_j f(\vec{r}_0) + \cdots$$
 (5)

其中第一项为常量,在体积为1的空间积分得到本身;第二项关于中心点为奇宇称,积分必为0。 考虑第三项:

$$egin{aligned} & \iiint_{(ec{r}_0,\Delta)} (r_i - r_{0i}) (r_j - r_{0j}) \partial_i \partial_j f|_{ec{r}_0} dV \ = & \iiint_{(0,\Delta)} \sum_{i=1}^3 \delta_i^2 \partial_i \partial_i f|_{ec{r}_0} dV \ = & \Delta \Delta \cdot rac{1}{3} rac{\Delta^3}{4}
abla^2 f(ec{r}_0) \ = & rac{\Delta^5}{12}
abla^2 f(ec{r}_0) \end{aligned}$$

求 $f(\vec{r}_0)$ 在格点处的Laplace:

$$egin{align}
abla^2 f &= rac{1}{r^2} rac{\partial}{\partial r} \left(r^2 rac{\partial}{\partial r} f
ight) \ &= rac{2r^2 + 6q^2}{(r^2 - q^2)^3}
onumber \end{align}$$

因此可以得出对原式的一个估计

$$egin{split} f(q^2) &= \left(\sum_{ec{n} \in \mathbb{Z}^3} - \int d^3ec{n}
ight) rac{1}{|ec{n}|^2 - q^2} \ &= rac{-1}{12} \sum_{ec{n}} rac{2n^2 + 6q^2}{(n^2 - q^2)^3} + \sum_{ec{n}} O(|
abla^3 f(ec{n})|) + \cdots \end{split}$$

由于积分对奇数次幂项一定为零,因此我们可以进一步得到

$$f(q^2) = rac{-1}{12} \sum_{ec{n}} rac{2n^2 + 6q^2}{(n^2 - q^2)^3} + \sum_{ec{n}} O(|
abla^4 f(ec{n})|) + \cdots$$

通过积分近似,可以得知这些项的收敛规律: $|\vec{n}|<\Lambda,\quad\Lambda>>1$ 得到,上式中第一项 $\sim\frac{1}{\Lambda}$,第二项 $\sim\frac{1}{\Lambda^3}$ 。 当我们计算 $|\vec{n}|<\Lambda$ 处的 $(\sum-\int d^3n)\frac{1}{n^2-q^2}$ 的值后,为了估算计算值与真实值之间的误差,我们用上式估计,有:

$$(\sum_{|ec{n}|>\Lambda} - \int_{\Lambda}^{\infty} d^3n) rac{1}{n^2-q^2} pprox -rac{1}{12} \sum_{|ec{n}|>\Lambda} rac{2n^2+6q^2}{(n^2-q^2)^3} + O(\Lambda^{-3})$$

b.题目解答

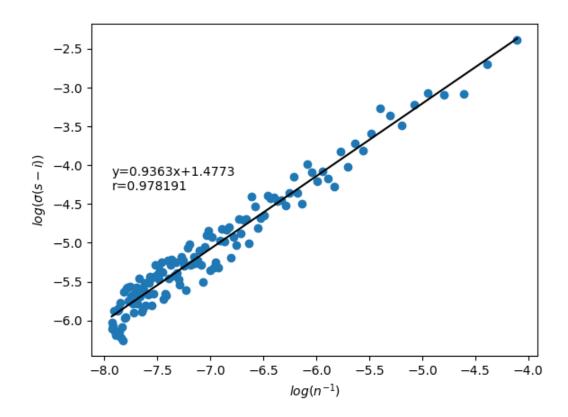
4.1

f(0.5)的近似值可以通过程序直接计算得到。详情请看T4.py。这个程序实现了通过累计球壳的和来计算 f(0.5)的值,并把json数据存储在data中。提交作业时已经计算了 $\Gamma \approx 3600$ 的结果。可直接运行来继续得到更高的结果,输入ctrl+C可自动终止并保存数据。

$$f(0.5) \approx 1.106$$

4.2

由于误差首项正比于 Λ^{-1} ,我们可以预测,当计算精度达到 10^{-5} 时大致需要 $\Lambda\sim 10^{5}$ 。 为了得到更精确的数据,我们对计算数据进行拟合。取相邻20项计算标准差,与当前的半径值进行对数拟合,得到如下图所示结果:



可以看到, 拟合曲线为:

$$\log \sigma = 0.93634 \log n^{-1} + 1.47726 \quad R = 0.978$$

其中的比例系数k=0.936接近1,说明之前的近似是合理的。 代入 $\sigma=10^{-5}$,得到 $n\approx 1.06\times 10^6$

4.3

为了提高求和效率,我们接下来寻找该求和的其他表达形式,使得其收敛的速度更快。 定义 $l(q,\vec{r})$ 如下:

$$l(q,ec{r}) = \left(\sum_{ec{n} \in \mathbb{Z}^3} - \int d^3ec{n}
ight) rac{e^{iec{n}\cdotec{r}}}{|ec{n}|^2 - q^2}$$

那么 $\lim_{|\vec{r}|\to 0} l(q,\vec{r})$ 就是我们要求的值我们先考虑前面的求和项, 将其拆分为

$$egin{aligned} \sum_{ec{n}} rac{e^{iec{n}\cdotec{r}}}{|ec{n}|^2-q^2} &= \sum_{ec{n}} rac{e^{iec{n}\cdotec{r}}e^{-\left(|ec{n}|^2-q^2
ight)}}{|ec{n}|^2-q^2} + \sum_{ec{n}} rac{e^{iec{n}\cdotec{r}}\left(1-e^{-\left(|ec{n}|^2-q^2
ight)}
ight)}{|ec{n}|^2-q^2} \ &= \sum_{ec{n}} rac{e^{iec{n}\cdotec{r}}e^{-\left(|ec{n}|^2-q^2
ight)}}{|ec{n}|^2-q^2} + \sum_{ec{n}} \int_0^1 dt e^{iec{n}\cdotec{r}}e^{-t\left(|ec{n}|^2-q^2
ight)} \end{aligned}$$

将后面一项的求和号与积分号交换得到

$$\int_0^1 dt e^{tq^2} \sum_{ec{n}} e^{i ec{n} \cdot ec{r}} e^{-t |ec{n}|^2}$$

采用Possion求和公式

$$egin{aligned} \sum_{ec{n}\in\mathbb{Z}^3}f(ec{n}) &= \sum_{ec{k}\in\mathbb{Z}^3}\hat{f}(ec{k}) \ \hat{f}(ec{k}) &= \int \mathrm{d}^3ec{n}f(ec{n})e^{-i2\piec{k}\cdotec{n}} \end{aligned}$$

代入 $f(\vec{n})$ 的表达式:

$$\begin{split} \hat{f}(\vec{k}) &= \int \mathrm{d}^{3}\vec{n}e^{i\vec{n}\cdot\vec{r}-t|\vec{n}|^{2}}e^{-i2\pi\vec{k}\cdot\vec{n}} \\ &= \int \mathrm{d}^{3}\vec{n}e^{i\vec{n}\cdot(\vec{r}-2\pi\vec{k})-t|\vec{n}|^{2}} \\ &= 2\pi \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}nn^{2} \int_{0}^{\pi} \mathrm{d}\theta \sin\theta e^{i|\vec{r}-2\pi\vec{k}|n\cos\theta-tn^{2}} \\ &= 2\pi \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}nn^{2} \frac{2\sin(|\vec{r}-2\pi\vec{k}|n)}{|\vec{r}-2\pi\vec{k}|n} e^{-tn^{2}} \\ &= \left(\frac{\pi}{t}\right)^{3/2} e^{-\frac{|\vec{r}-2\pi\vec{k}|^{2}}{4t}} \end{split}$$

观察可以发现, $f(\vec{n})$ 在t较大时收敛较快, $f(\vec{k})$ 在t较小时收敛较快于是我们使用Poisson求和公式可以提高求和的收敛速度。 求和项写作:

$$\sum_{ec{n} \in \mathbb{Z}^3} rac{e^{iec{n}\cdotec{r}}}{|ec{n}|^2 - q^2} = \sum_{ec{n} \in \mathbb{Z}^3} rac{e^{iec{n}\cdotec{r}}e^{-\left(|ec{n}|^2 - q^2
ight)}}{|ec{n}|^2 - q^2} + \int_0^1 dt e^{tq^2} \sum_{ec{k} \in \mathbb{Z}^3} \left(rac{\pi}{t}
ight)^{3/2} e^{-rac{|ec{r} - 2\piec{k}|^2}{4t}}$$

但后面一项中 $\vec{k}=\vec{0}$ 的项是发散的,这对应了求和中的发散项。 于是我们需要改写原公式中的积分形式:

$$\begin{aligned} &\text{P.V.} \quad \iiint \frac{e^{-i\vec{r}\cdot\vec{n}}}{|\vec{n}|^2 - q^2} d^3\vec{n} \\ &= &\text{P.V.} \quad \int_0^\infty dn \int_0^\pi d\theta e^{-irn\cos\theta} \frac{2\pi n^2\sin\theta}{n^2 - q^2} \\ &= &2\pi \frac{2}{r} \text{ P.V.} \quad \int_0^\infty dn \frac{n\sin rn}{n^2 - q^2} \\ &= &2\pi \frac{1}{r} \text{ Im P.V.} \quad \left(\int_{-\infty}^\infty dn \frac{ne^{irn}}{n^2 - q^2} \right) \\ &= &2\pi^2 \frac{\cos rq}{r} \end{aligned}$$

最后一个等号可以通过留数定理得到:

$$ext{P.V.} \int_{-\infty}^{\infty} dn rac{n e^{irn}}{n^2 - q^2} = \pi i (ext{resf}(-q) + ext{res}\, f(q)) = \pi i \cos r q$$

取r很小的展开:

$$egin{aligned} ext{P.V.} & \iiint rac{e^{-iec{r}\cdotec{n}}}{|ec{n}|^2-q^2}d^3ec{n} = 2\pi^2rac{\cos rq}{r} \ &= rac{2\pi^2}{r} + \mathcal{O}(r) \ &= \int_0^\infty ext{d}t \left(rac{\pi}{t}
ight)^{3/2} e^{-rac{r^2}{4t}} + \mathcal{O}(r) \ &= \int_0^\infty ext{d}t \left(rac{\pi}{t}
ight)^{3/2} e^{-rac{|ec{r}-2\piec{k}|^2}{4t}} igg|_{ec{k}=ec{0}} + \mathcal{O}(r) \end{aligned}$$

我们将级数和积分合并起来

$$egin{aligned} l(q,ec{r}) &= \sum_{ec{n} \in \mathbb{Z}^3} rac{e^{iec{n}\cdotec{r}}e^{-\left(|ec{n}|^2-q^2
ight)}}{|ec{n}|^2-q^2} + \int_0^1 dt e^{tq^2} \sum_{ec{k} \in \mathbb{Z}^3} \left(rac{\pi}{t}
ight)^{3/2} e^{-rac{|ec{r}-2\piec{k}|^2}{4t}} - \int_0^\infty \mathrm{d}t \left(rac{\pi}{t}
ight)^{3/2} e^{-rac{|ec{r}-2\piec{k}|}{4t}} igg|_{ec{k}=ec{0}} + \mathcal{O}(r) \ &= \sum_{ec{n} \in \mathbb{Z}^3} rac{e^{iec{n}\cdotec{r}}e^{-\left(|ec{n}|^2-q^2
ight)}}{|ec{n}|^2-q^2} + \int_0^1 dt e^{tq^2} \sum_{ec{k} \in \mathbb{Z}^3, ec{k}
eq ec{0}} \left(rac{\pi}{t}
ight)^{3/2} e^{-rac{|ec{r}-2\piec{k}|^2}{4t}} \ &- \int_0^\infty \mathrm{d}t \left(rac{\pi}{t}
ight)^{3/2} e^{-rac{r^2}{4t}} + \int_0^1 \mathrm{d}t \left(e^{tq^2}-1
ight) \left(rac{\pi}{t}
ight)^{3/2} e^{-rac{r^2}{4t}} + \mathcal{O}(r) \end{aligned}$$

在这个式子中我们可以轻松取 $\vec{r} \rightarrow \vec{0}$ 的极限, 得到

$$egin{split} l(q,ec{0}) &= \sum_{ec{n} \in \mathbb{Z}^3} rac{e^{-\left(|ec{n}|^2 - q^2
ight)}}{|ec{n}|^2 - q^2} + \int_0^1 dt e^{tq^2} \sum_{ec{k} \in \mathbb{Z}^3, ec{k}
eq ec{0}} \left(rac{\pi}{t}
ight)^{3/2} e^{-rac{\pi^2 |ec{k}|^2}{t}} \ &- \int_1^\infty \mathrm{d}t \left(rac{\pi}{t}
ight)^{3/2} e^{-rac{r^2}{4t}} + \int_0^1 \mathrm{d}t \left(e^{tq^2} - 1
ight) \left(rac{\pi}{t}
ight)^{3/2} \end{split}$$

对积分化简,可以得到

$$egin{align} l(q,ec{0}) &= \sum_{ec{n} \in \mathbb{Z}^3} rac{e^{-\left(|ec{n}|^2 - q^2
ight)}}{|ec{n}|^2 - q^2} + \int_0^1 dt e^{tq^2} \sum_{ec{k} \in \mathbb{Z}^3, ec{k}
eq ec{0}} \left(rac{\pi}{t}
ight)^{3/2} e^{-rac{\pi^2 |ec{k}|^2}{t}} \ &- 2\pi^{rac{3}{2}} e^{q^2} + 2\pi^2 q \operatorname{erfi}(q) \end{array}$$

其中erfi(x)定义为

$$\operatorname{erfi}(q) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{t^2} dt$$

通过该种方式的计算程序为T4 Fourier.py可以看到,该求和收敛速度很快,达到n=7时精度已经有16位.

```
(base) D:\PKU\notes\Computational Physics\homework-1>python T4_Fourier.py
1 -8.350851754936643
2 0.9754399409192533
3 1.1051729849172247
4 1.106162251048497
5 1.1061625668146355
6 1.1061625668715358
7 1.1061625668715358
8 1.1061625668715358
```

9 1.1061625668715358