计算物理第一次作业

- 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 (建议用 LaTeX 进行排版)。
- 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、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。
- 所有文件打包为压缩文件夹后发送到课程的公邮 (num_phys2022@163.com)。压缩包的文件名和邮件题目请取为 "学号 + 姓名 + 第几次作业"。作业收到后自动回复。

1. 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：

（1）直接展开法

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

（2）递归法

$$\begin{aligned} e^{-x} &= \sum_{0}^{\infty} s_n = \sum_{0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^n}{n!} \\ s_n &= -s_{n-1} \frac{x}{n} \end{aligned}$$

（3）先利用（2）计算 e^x，然后求倒数。

2. **矩阵的模和条件数**　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，而所有上三角部分都为 -1。

(a) 计算矩阵 A 的行列式，说明 A 的确不是奇异矩阵。

(b) 给出矩阵的逆矩阵 A^{-1} 的形式。

(c) 如果采用矩阵 p 模的定义

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

其中等式右边 $\|\cdot\|_p$ 是标准定义的矢量 p 模，说明如果取 $p\to\infty$，得到所谓 ∞ 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 $\|\cdot\|_2$。对于幺正矩阵 $U\in\mathbb{C}^{n\times n}$，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，如果利用欧氏模定义条件数，$K_2(A)=K_2(UA)$。

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

3.**Hilbert 矩阵**　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 $P_n(x)=\sum_{i=1}^{n}c_ix^{i-1}$（从而有 n 个待定系数 c_i）来近似 $f(x)$。构建两者之间的差的平方的积分

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

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

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

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）。

(b) 证明矩阵 H_n 是对称的正定矩阵，即对于任意的 $c\in\mathbb{R}^n$，说明 $c^T\cdot H_nc\geq 0$ 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。

(c) 虽然矩阵 H_n 是非奇异的，但是它的行列式随着 n 的增加会迅速减小。事实上，它的行列式竟然有严格的表达式：

$$\det(H_n)=\frac{c_n^4}{c_{2n}},\quad c_n=1!\cdot 2!\cdots(n-1)!$$

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)。

(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 $b=(1,1,\cdots,1)\in\mathbb{R}^n$。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。

4. **级数求和与截断误差**　计算级数与积分的差

$$f\left(q^2\right)=\left(\sum_{\vec{n}\in\mathbb{Z}^3}-\int d^3\vec{n}\right)\frac{1}{|\vec{n}|^2-q^2},$$

这里 $\mathbb{Z}^3$ 为三维矢量的集合，当 $\vec{n}=(n_1,n_2,n_3)\in\mathbb{Z}^3$ 时，n_1,n_2,n_3 全为整数。

(a) 请求出 $f\left(q^2\right)$ 在 $q^2=0.5$ 处的值。

(b) 引入截断 Λ 使得 $|\vec{n}|\leq\Lambda$。要使 $f(q^2=0.5)$ 的计算精度达到 10^{-5}，需要 Λ 多大?

(c) 有没有办法改变 $f\left(q^2\right)$ 的表达形式，使得计算 $f\left(q^2\right)$ 的效率远高于题干中公式给出的级数求和的效率。