计算物理第四次作业　作业解答

隋源　2000011379

Dec 10th 2022

1. 下降算法求解方程组

根据最速下降法和共轭梯度法求解方程组的原理实现代码，并通过控制输出判定量级保证解的精度（详见原代码）。方程组的解和对应的迭代次数为（计算结果由 gradient.py 给出）

x	x_1	x_2	x_3	x_4	迭代次数
最速下降法	0.99999928	1.00000043	1.00000018	0.99999989	13235
共轭梯度法	0.99999921	1.00000048	1.00000020	0.99999988	1101

可以看到当解的精度基本相同时共轭梯度法迭代次数明显更少。为了更直观严谨地说明这一点，计算不同输出判定量级下的解误差量级和迭代次数如下图

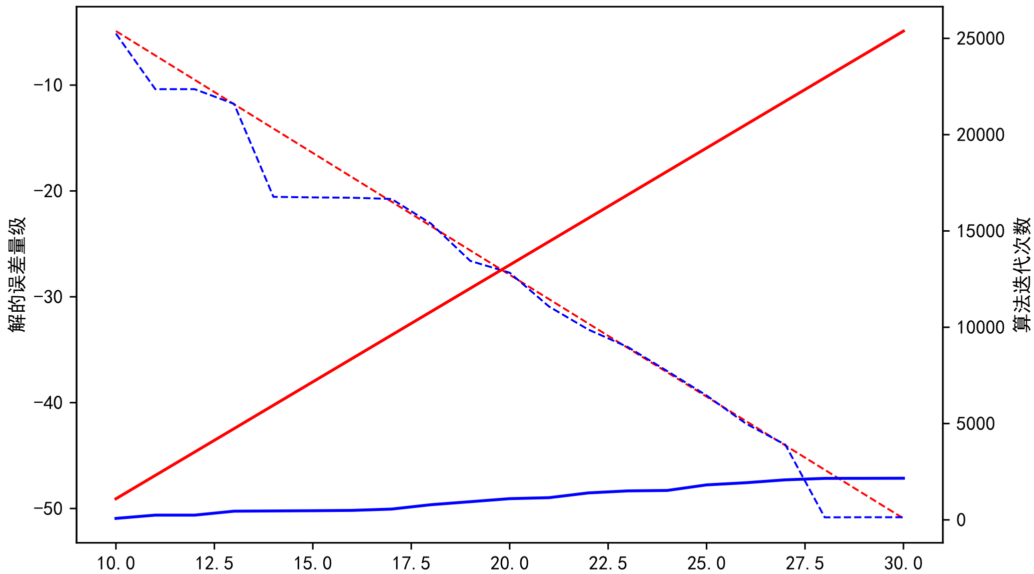

图 1: 不同输出判定量级下的解误差量级和迭代次数（红、蓝分别是最速下降法和共轭梯度法；实、虚分别是迭代次数和解的无常量级）。可以看到解的误差量级基本一致时，二者迭代次数差别明显。横坐标为输出判定量级，详见源代码。

2. 不同方法求解本征值

(a)QR 算法

由于给定的矩阵已经是 Hessenberg 矩阵，因此可以直接利用 Givens 变换实现 QR 分解，经过不断迭代可达到对角化目的。结果如下（计算结果由 qr.py 给出）

```
5次QR分解的结果是
[ 4.29276628e+00 -7.21313977e-01  8.15850807e-17 -1.31961097e-16]
[-7.21313977e-01  3.55611356e+00 -3.34967464e-01 -1.53153476e-16]
[-8.27470775e-17 -3.34967464e-01  1.89640130e+00 -3.99652715e-04]
[ 8.29046555e-17 -1.04039177e-16 -3.99652715e-04  2.54718859e-01]
10次QR分解的结果是
[ 4.73418406e+00 -1.31448547e-01  2.52110885e-16 -3.29608562e-17]
[-1.31448547e-01  3.18812610e+00 -1.85822775e-02 -2.56261837e-16]
[-7.20487589e-17 -1.85822775e-02  1.82297108e+00 -2.07643130e-08]
[ 1.21779501e-16 -5.44230560e-17 -2.07643133e-08  2.54718760e-01]
15次QR分解的结果是
[ 4.74507887e+00 -1.78120256e-02  2.77175712e-16 -1.41149607e-17]
[-1.78120256e-02  3.17748431e+00 -1.15075434e-03 -2.61394513e-16]
[-7.20169388e-17 -1.15075434e-03  1.82271806e+00 -1.10632201e-12]
[ 1.25418418e-16 -4.54143473e-17 -1.10658664e-12  2.54718760e-01]
20次QR分解的结果是
[ 4.74527757e+00 -2.39738535e-03  2.80354397e-16 -1.15435034e-17]
[-2.39738535e-03  3.17728658e+00 -7.14944440e-05 -2.61731420e-16]
[-7.20175820e-17 -7.14944440e-05  1.82271708e+00  2.05476949e-16]
[ 1.25858851e-16 -4.41790942e-17 -5.89788044e-17  2.54718760e-01]
```

更多结果详见源代码 (计算过程中有舍入误差导致非对角元不再对称，但本征值无影响)

(b)Jacobi 算法

同样利用 Givens 变换，每次使一个非对角元变为 0 称为一次迭代，经过不断迭代可达到对角化目的，从而实现 Jacobi 算法。结果如下（计算结果由 jacobi.py 给出）

```
5次Jacobi算法的结果是
[ 3.02671876e-01  1.98877843e-01 -1.22228453e-17  3.90083050e-01]
[ 1.98877843e-01  3.15387625e+00 -1.13689848e-01  1.24506891e-16]
[-1.42068694e-16 -1.13689848e-01  1.84612375e+00  1.98877843e-01]
[ 3.90083050e-01  1.71095523e-16  1.98877843e-01  4.69732812e+00]
10次Jacobi算法的结果是
[ 2.54777527e-01  8.28956379e-04 -9.51832874e-03 -1.84018719e-03]
[ 8.28956379e-04  3.17728268e+00 -4.96426137e-06 -6.38048385e-15]
[-9.51832874e-03 -4.96426137e-06  1.82265953e+00  8.17755211e-04]
[-1.84018719e-03 -6.31149087e-15  8.17755211e-04  4.74528026e+00]
15次Jacobi算法的结果是
[ 2.54718760e-01 -2.61234084e-12  3.41591981e-07  1.92435201e-10]
[-2.61241192e-12  3.17728292e+00  5.77502481e-12 -3.41591980e-07]
[ 3.41591980e-07  5.77499698e-12  1.82271708e+00 -2.61219078e-12]
[ 1.92435105e-10 -3.41591980e-07 -2.61243658e-12  4.74528124e+00]
20次Jacobi算法的结果是
[ 2.54718760e-01 -2.61230016e-12 -1.21082057e-10  1.92435202e-10]
[-2.61237124e-12  3.17728292e+00  5.77502367e-12  1.21082157e-10]
[-1.21082203e-10  5.77499584e-12  1.82271708e+00 -2.61215010e-12]
[ 1.92435106e-10  1.21082226e-10 -2.61239590e-12  4.74528124e+00]
```

更多结果详见源代码。

(c)Sturm 序列、对分法

首先利用圆盘定理求出上下限

$$\alpha = \min_{1\le i\le n}[d_i - (|b_{i-1}| + |b_i|)] = 0$$

$$\beta = \max_{1\le i\le n}[d_i + (|b_{i-1}| + |b_i|)] = 5$$

再利用 Sturm 序列的性质，结合对分法求解各个本征值的近似值。不同次迭代结果如下（计算结果由 sturm.py 给出）

迭代次数	λ_1	λ_2	λ_3	λ_4
5	0.15625000	1.71875000	3.28125000	4.84375000
10	0.25878906	1.82128906	3.17871094	4.74121094
15	0.25466919	1.82266235	3.17733765	4.74533081
20	0.25472164	1.82271481	3.17728519	4.74527836

更多结果详见源代码。

3. 幂次法求矩阵最大模的本征值和本征矢

(a)

一维的原子链经典振动的矩阵方程为

$$\ddot{x} = -A \cdot x$$

其中

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

代入 $x(t) = xe^{-i\omega t}$ 得到

$$Ax = -\ddot{x} = \omega^2 x = \lambda x$$

证毕。

(b)

假设矩阵 A 可对角化，则只要初始矢量 $q^{(0)}$ 在 $v1$ 方向投影不恒为 0，则可以由 A 的正交归一完备基展开

$$q^{(0)} = \sum_{i=1}^{N} c_i v_i, \quad c_1 \neq 0$$

迭代得到

$$q^{(k)} = \frac{A^k q^{(0)}}{||A^k q^{(0)}||} = \frac{\sum_{i=1}^{N} c_i \lambda_i^k v_i}{(\sum_{i=1}^{N} |c_i \lambda_i^k|^2)^{1/2}}$$

其中 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq ... \geq \lambda_N$。显然 $k \to \infty$ 时有极限

$$\lim_{k\to\infty} q^{(k)} = \lim_{k\to\infty} \frac{\sum_{i=1}^{N} c_i \lambda_i^k v_i}{(\sum_{i=1}^{N} |c_i \lambda_i^k|^2)^{1/2}} = v_1$$

另一方面

$$\begin{aligned}
\lim_{k\to\infty} \nu^{(k)} &= \lim_{k\to\infty} [q^{(k)}]^\dagger A q^{(k)} \\
&= \lim_{k\to\infty} [q^{(k)}]^\dagger q^{(k+1)} ||Aq^{(k)}|| \\
&= \lim_{k\to\infty} [q^{(k)}]^\dagger q^{(k+1)} \frac{||A^{k+1} q^{(0)}||}{||A^k q^{(0)}||} \\
&= v_1^\dagger v_1 \lambda_1 \\
&= \lambda_1
\end{aligned}$$

证毕。利用这一方法求解 $N = 10$ 时的问题，迭代 1000 次，得到最大本征值和相应的本征矢（计算结果由 power.py 给出）

$$\lambda_1 = 4.00000$$

$$v_1 = [1, -1, 1, -1, 1, -1, 1, -1, 1, -1] * 0.316227766$$

4. 洛伦兹吸引子可视化

常微分方程

$$\begin{bmatrix} y_1' \\ y_2' \\ y_3' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\beta & 0 & y_2 \\ 0 & -\sigma & \sigma \\ -y_2 & \rho & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix}$$

定初始坐标为 $(1,1,1)$，步长 0.001，采取四种不同的 (σ,ρ,β) 迭代 20000 次，图像如下（计算结果由 lorenz.py 给出）

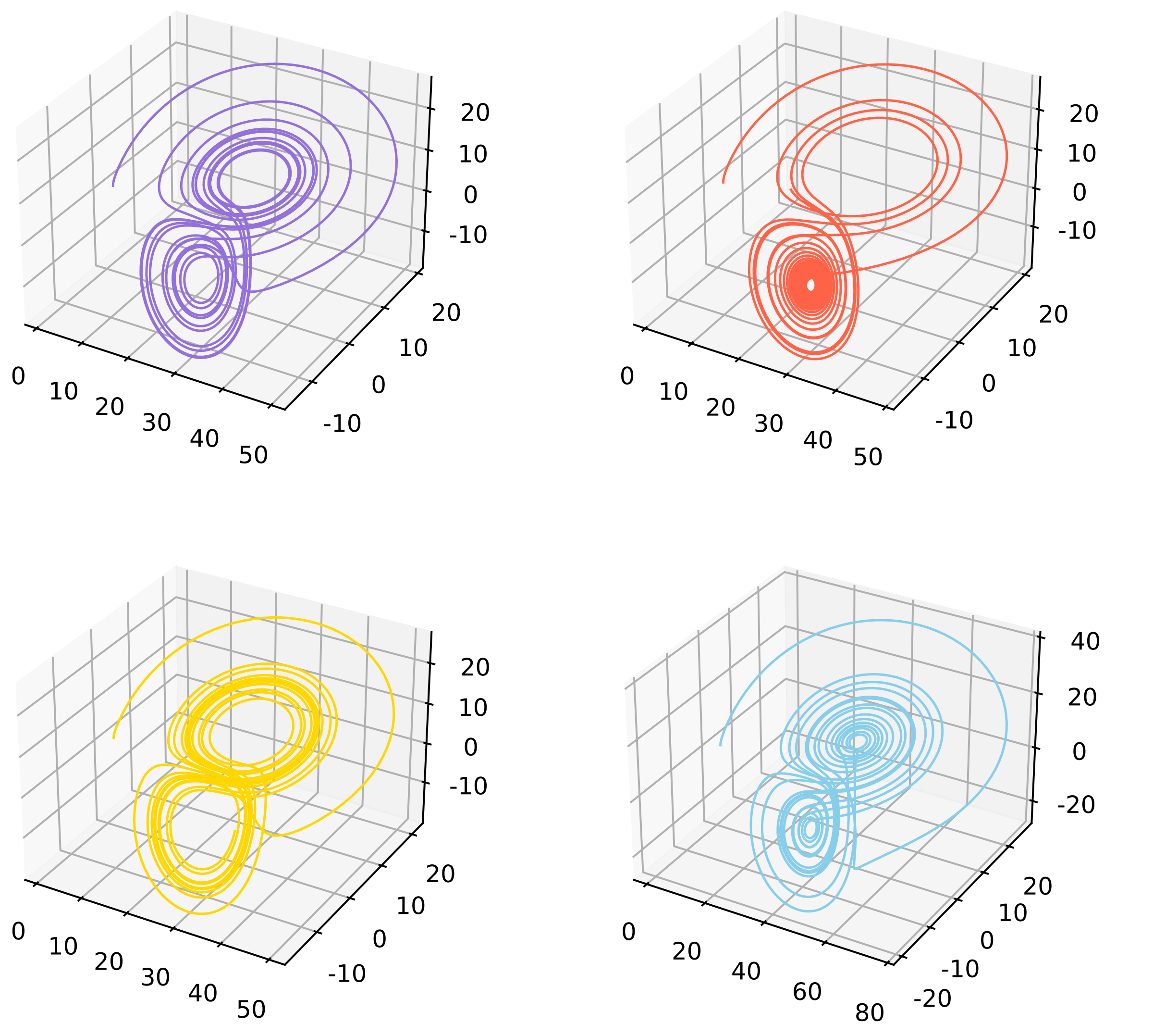

图 2: 不同参数下 (σ,ρ,β) 的洛伦兹吸引子图像：左上（10，28，5/3），右上（10，28，5/3*1.5），左下（10*1.5，28，5/3），右下（10，28*1.5，5/3）