

## 计算物理第四次作业

- 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. 编写最速下降和共轭梯度算法, 求解

$$0.05x_1 + 0.07x_2 + 0.06x_3 + 0.05x_4 = 0.23$$

$$0.07x_1 + 0.10x_2 + 0.08x_3 + 0.07x_4 = 0.32$$

$$0.06x_1 + 0.08x_2 + 0.10x_3 + 0.09x_4 = 0.33$$

$$0.05x_1 + 0.07x_2 + 0.09x_3 + 0.10x_4 = 0.31$$

2. 利用 QR 算法、Jacobi 算法、Sturm 序列 + 对分法, 求下列矩阵的本征值

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

对于 QR 算法和 Jacobi 算法, 请写出第 5,10,15,20,... 次迭代后的矩阵  $T_k$ 。对于 Sturm 序列 + 对分法请写出由圆盘定理确定的本征值范围以及第 5,10,15,20,... 次迭代后本征值的近似值。

3. **幂次法求矩阵最大模的本征值和本征矢** 本题中我们考虑利用幂次法 (power method) 来求一个矩阵  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  的本征值的问题。同时将它运用到一个具体的实例: 一维原子链的振动。

考虑一个一维的原子链的经典振动问题。假定我们有  $N$  个原子，每个都具有质量  $m$ ，均匀相间排列在  $x$  轴上。相邻两个原子间有相同的弹簧（倔强系数均为  $k$ ）相连。为了简化讨论我们取  $k/m = 1$ 。整个原子链上的原子可以在其平衡位置附近做小振动。如果我们将第  $i$  个原子偏离平衡位置的位移记为  $x_i(t)$ ，那么这些原子满足的经典运动方程为：

$$\ddot{x}_i - [x_{i-1} + x_{i+1} - 2x_i] = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (2)$$

当然为了明确起见，我们还必须加上合适的边界条件。为了方便我们取周期性边界条件，即  $x_{i+N}(t) \equiv x_i(t)$ 。因此，物理上这  $N$  个粒子实际上是连成一个圆环。于是上述方程可以写为矩阵方程，

$$\ddot{x} = -A \cdot x \quad (3)$$

其中  $A$  是一个矩阵，其矩阵元为

$$(-A)_{ij} = \delta_{i-1,j} + \delta_{i+1,j} - 2\delta_{i,j} \quad (4)$$

$x(t) = (x_1(t), \dots, x_N(t))^T \in \mathbb{C}^N$  是解矢量。我们将尝试  $x(t) = xe^{-i\omega t}$  的解，从而振幅  $x$  原则上可以是任意的复矢量，真实的物理的解被认为是这个复矢量解的实部： $x_{\text{phy.}}(t) = \Re(x(t))$ 。

(a) 考虑一个一维的原子链的经典振动解，尝试  $x(t) = xe^{-i\omega t}$ ，说明振幅  $x \in \mathbb{C}^n$  满足本征方程： $A \cdot x = \lambda x$ ，本征值  $\lambda = \omega^2$ 。

(b) 是的，这个题目可以轻易地解析求解。但现在我们假装不知道这点。请写一个利用下面介绍的幂次法求解上述本征值问题的程序。求出体系最大的本征频率的平方  $\omega_{\text{max}}^2$ 。这对应于最大的  $\lambda$ 。

**【幂次法】**：我们从任意一个单位矢量  $q^{(0)} \in \mathbb{C}^N$  出发，我们从  $k = 1, 2, \dots$  开始构造迭代，

$$z^{(k)} = A \cdot q^{(k-1)}, \quad q^{(k)} = z^{(k)} / \|z^{(k)}\|, \quad (5)$$

$$\nu^{(k)} = [q^{(k)}]^\dagger A q^{(k)} \quad (6)$$

现在假定矩阵  $A$  是可对角化的，从而它的本征值构成一组完备的基。我们约定矩阵  $A$  的本征值排列如下， $\lambda_1 > \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_N$ 。相应的本征矢记为  $v_1, \dots, v_N$ 。它们可以构成正交归一完备的一组基矢。将初始的矢量  $q^{(0)}$  按照本征矢进行展开。证明只要初始的矢量  $q^{(0)}$  在  $v_1$  方向的投影不恒等于零，上述的幂次法迭代最终会获得相应的本征值和本征矢，即：

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \nu^{(k)} = \lambda_1, \quad \lim_{k \rightarrow \infty} q^{(k)} = v_1 \quad (7)$$

最后，对于  $N = 10$  的情形，利用你的程序给出相应的本征值以及本征矢。

4. 参考课件“常微分方程”中的“洛伦兹吸引子”，重复结果，并额外给出至少 2 组不同的  $\beta, \rho, \sigma$  的结果

$$\begin{pmatrix} y_1' \\ y_2' \\ y_3' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\beta & 0 & y_2 \\ 0 & -\sigma & \sigma \\ -y_2 & \rho & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} \quad (8)$$