

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

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

(2) 递归法

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

(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 。

- 计算矩阵 A 的行列式, 说明 A 的确不是奇异矩阵。
- 给出矩阵的逆矩阵 A^{-1} 的形式。
- 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 $p \rightarrow \infty$, 得到所谓 ∞ 模为,

$$\|A\|_\infty = \max_{i=1, \dots, n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$$

(d) 矩阵的模有多种定义方法, 一种常用的是 $p = 2$ 的欧氏模 $\|\cdot\|_2$ 。对于么正矩阵 $U \in \mathbb{C}^{n \times n}$, 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 $P_n(x) = \sum_{i=1}^n c_i x^{i-1}$ (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

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

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

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

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 $c^T \cdot H_n c \geq 0$ 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 $b = (1, 1, \dots, 1) \in \mathbb{R}^n$ 。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

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

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 $f(q^2)$ 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 $f(q^2)$ 的表达形式, 使得计算 $f(q^2)$ 的效率远高于题干中公式给出的级数求和的效率。