计算物理作业 2

作业说明：

a. 完成所有题目，作业提交截止时间为 2023 年 11 月 11 日 18:00。迟交作业将只能取得本次作业所得分数的 90%。每人有一次迟交作业且不影响成绩的机会，且该次迟交须在规定截止时间的 48 小时内。病假等其他向助教在截止时间前说明的特殊情况除外。
b. 请提交一个 PDF 格式的作业解答（或可使用 Jupyter notebook 等可以同时包含代码、输出结果、markdown 的文件），其中可以描述相应的解题步骤，必要的图表等。
c. 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、运行、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。
d. 本次作业相关的所有文件打包到一个压缩文件后发送到课程的公邮，地址为 com_phy2023@163.com。压缩包的文件名和邮件题目请取为“学号-姓名-hw2”（例如 210000000-张三-hw2）。
e. 作业严禁抄袭，助教会抽查部分同学当面对作业内容进行提问。

作业题目：

1. 编写高斯消元法和 Cholesky 方法的代码，并求解如下线性方程组：

$$
\begin{aligned}
0.05x_1+0.07x_2+0.06x_3+0.05x_4&=0.23\\
0.07x_1+0.10x_2+0.08x_3+0.07x_4&=0.32\\
0.06x_1+0.08x_2+0.10x_3+0.09x_4&=0.33\\
0.05x_1+0.07x_2+0.09x_3+0.10x_4&=0.31
\end{aligned}
$$

2. 对 $f(x)=\cos(x^2)$，$x_0=0$，$x_1=0.6$，$x_2=0.9$，采用三次样条插值。分别考虑如下两种边界条件

(a) $x_0=0$ 和 $x_2=0.9$ 端点处的二次导数值为 0

(b) 利用 $f(x)$ 得到 $x_0=0$ 和 $x_2=0.9$ 端点处的一次导数值

3. **Runge 效应** 考虑 Runge 函数 $f(x)=1/(1+25x^2)$ 在区间 $[-1,+1]$ 上的行为。本题中将分别利用等间距的多项式内插、Chebyshev 内插以及三次样条函数来近似 $f(x)$ 的数值。

(a) 考虑 $x\in[-1,+1]$ 之间 21 个均匀分布的节点（包括端点，相隔 0.1 一个点）的 20 阶多项式 $P_{20}(x)$ 之内插（你可以利用各种方法，例如拉格朗日内插、牛顿内插或者 Neville 方法）。给出一个表分别列出 x，$f(x)$，$P_{20}(x)$ 以及两者差的绝对值。为了看出两者的区别请在这 21 个点分成的每个小段的中点也取一个数据点并一起列出 (因此共有 41 个点)，同时画图显示之。

(b) 现在选取 n = 20 并将上问中均匀分布的节点换为标准的 Chebyshev 节点：

$$x_k=\cos\left(\frac{k+1/2}{20}\pi\right),k=0,1,\cdots,19$$

然后构造 $f(x)$ 在 $[-1,+1]$ 上的近似式，

$$f(x) \approx C(x) \equiv -\frac{c_0}{2} + \sum_{k=0}^{20} c_k T_k(x)$$

其中在各个 Chebyshev 的节点处我们要求它严格等于 $f(x)$。同样列出上问的表并画图，与上问结果比较。

(c) 仍然考虑第一问中均匀分布的21个节点的内插。但这次利用21点的三次样条函数。重复上面的列表、画图并比较。

4. **样条函数在计算机绘图中的运用** 本题中我们考虑 Cubic spline 在计算机绘图中的广泛运用。我们将尝试用三次样条函数平滑地连接若干个二维空间中已知的点。考虑二维空间的一系列点 $(x_i, y_i), i = 0,1,\cdots,n$。我们现在希望按照顺序（由 0 到 n）将它们平滑地连接起来。一个方便的办法是引入一个连续参数 $t \in [0,n]$，取节点为 $t_i = 0,1,\cdots,n$，然后分别建立两个样条函数：$S_\Delta(X;t)$ 和 $S_\Delta(Y;t)$，它们分别满足

$$S_\Delta(X;t_i) = x_i$$
$$S_\Delta(Y;t_i) = y_i$$

这两个样条函数可以看作是 $(x(t), y(t))$ 的内插近似。因此绘制参数曲线 $(x(t), y(t))$ 的问题就化为求出两个样条函数并将它们画出的问题。我们考虑的函数是著名的心形线（cardioid）。它的极坐标方程是

$$r(\phi) = 2a(1-\cos\phi) = 1-\cos\phi$$

为了方便起见我们取了 $2a = 1$。（请利用上一题中关于样条函数内插的相应代码来处理本题）

(a) 选取 $\phi = t\pi/4$，$t = 0,1,2,3,4,5,6,7,8$ 这九个点，给出 $x_t = r(\phi)\cos\phi$ 和 $y_t = r(\phi)\sin\phi$ 的数值。将这些数值作为精确的数值列在一个表里。

(b) 给出过这 8 个点的两个三次样条函数 $S_\Delta(X;t)$ 和 $S_\Delta(Y;t)$。

(c) 画出参数形式的曲线 $(x_t, y_t) = (S_\Delta(X;t), S_\Delta(Y;t))$，同时画出它所内插的严格的曲线进行比较，请标出相应的节点。

(d) 简要说明为什么这个算法可以平滑地连接所有的点 (这实际上是很多画图软件中 spline 曲线所采用的算法)。

5. 考虑一个对称矩阵

$$H = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix}$$

(a) 通过消元法求出三角矩阵 L 和对角矩阵 D，使 $H = LDL^{\mathrm{T}}$。

(b) 可以将矩阵 H 的一个角元 $H_{33} = 1$ 替换为 q，使矩阵 H 为半正定，求出最小的 q。

(c) 当 $H_{33} = 2$ 时，求解其本征值。进而求出扩展到 4×4 矩阵 H' 时的本征值。

$$H' = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$