一个月，数值方法与算法。

Mathematica

Ref：

Mathematica for physist

本征值，极值，插值，积分，随机数。

考题 1。

---

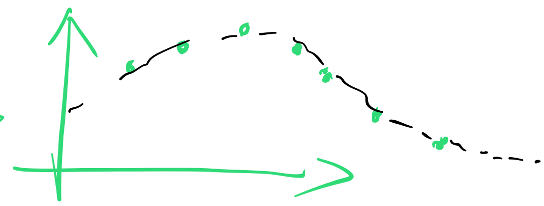
## 插值（Interpolation）

1> 目的。

2> 缺点：Runge 现象

3> 应用 => 积分

$(x_i, y_i) \Rightarrow$



拟合（最小二乘法）

多项式，若有数据点 $(x_1, y_1), \cdots (x_n, y_n)$

设，$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots a_{n-1} x^{n-1}$，

则有

$$\begin{cases} y_1 = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_1^2 + \cdots a_{n-1} x_1^{n-1} \\ \vdots \\ y_n = a_0 + a_1 x_n + a_2 x_n^2 + \cdots a_{n-1} x_n^{n-1} \end{cases}$$

线性方程组，一个矩阵形式。

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^{n-1} \\ \vdots & & & & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^{n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_{n-1} \end{pmatrix},$$

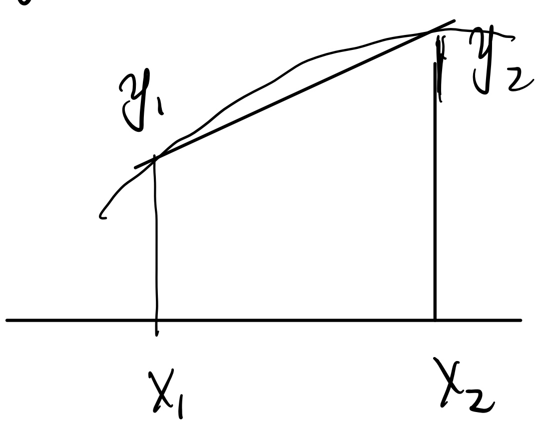
或者有 $y = Aa$ 有唯一解，形式复杂，

$R_n(x) \propto \prod_i (x - x_i)$ 只能给出形式解.

两个重要的插值：Lagrange, Newton.

特点：$\left\{ \begin{array}{l} \text{明确表达式.} \\ \text{讨论性质.} \end{array} \right.$

Lagrange Interpolation.




$$y = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1}(x - x_1) + y_1$$

$$= \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} y_2 + \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} y_1$$

$$= y_1 e_1(x) + y_2 e_2(x)$$

$$\begin{cases} e_1(x_1) = 1 \\ e_1(x_2) = 0. \\ e_2(x_1) = 0 \\ e_2(x_2) = 1 \end{cases}$$

构造法 $y = \sum_i e_i(x) y_i + R_n(x)$

$$e_i(x_j) = \delta_{ij}$$

e.g. $e_i(x) = A(x - x_1) \cdots (x - x_{i-1})$

$$(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)$$

更一般地，有 $$e_i(x) = \frac{\prod_{j\neq i}(x-x_j)}{\prod_{m\neq n}(x_m-x_n)}$$

恒等关系： $\sum_i e_i(x) = 1$.

牛顿插值.

$$f(x) = a_0 + a_1(x-x_1) + a_2(x-x_1)(x-x_2) + a_3(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3) + \cdots + a_{n-1}(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_{n-1})$$

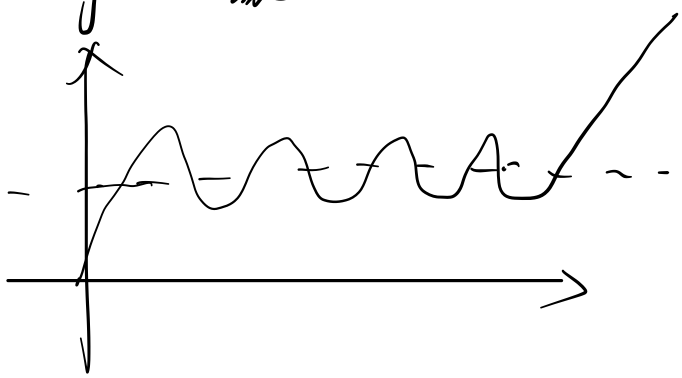
$$f(x_1) = a_0$$

$$f(x_2) = a_0 + a_1(x_2-x_1)$$

$$f(x_3) =$$

强调：三种多项式方法，原则上都是等价的。

Runge 现象



材料：

Runge

Mathematica 中的两个命令.

<1> Interpulation [ {$x_1$, $y_1$}, {$x_2$, $y_2$}, ‥‥ {$x_n$, $y_n$} ]

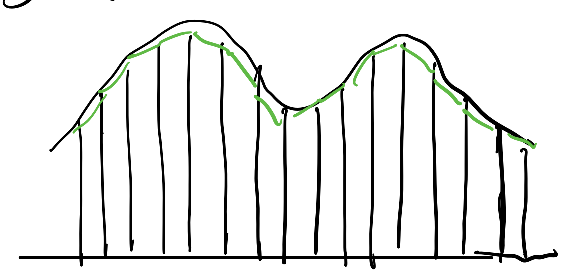
<2> Interpolating Polynormial

[ {$x_1$, $y_1$}, {$x_2$, $y_2$}, ‥‥ {$x_n$, $y_n$} ]

插值的目的. (求积分)

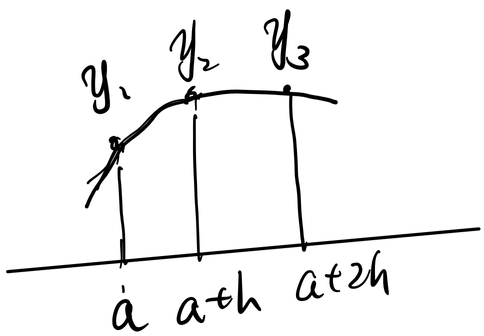
$$\int_a^b f(x)\,dx$$

图像



①

梯形近似

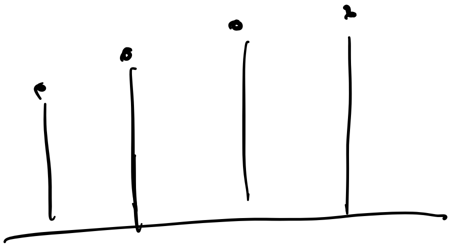



$$y = e_1(x)y_1 + e_2(x)y_2 + e_3(x)y_3$$

$$S = \int_a^{a+2h} y\,dx$$

$$= \frac{1}{3}(y_1 + 4y_2 + y_3)$$

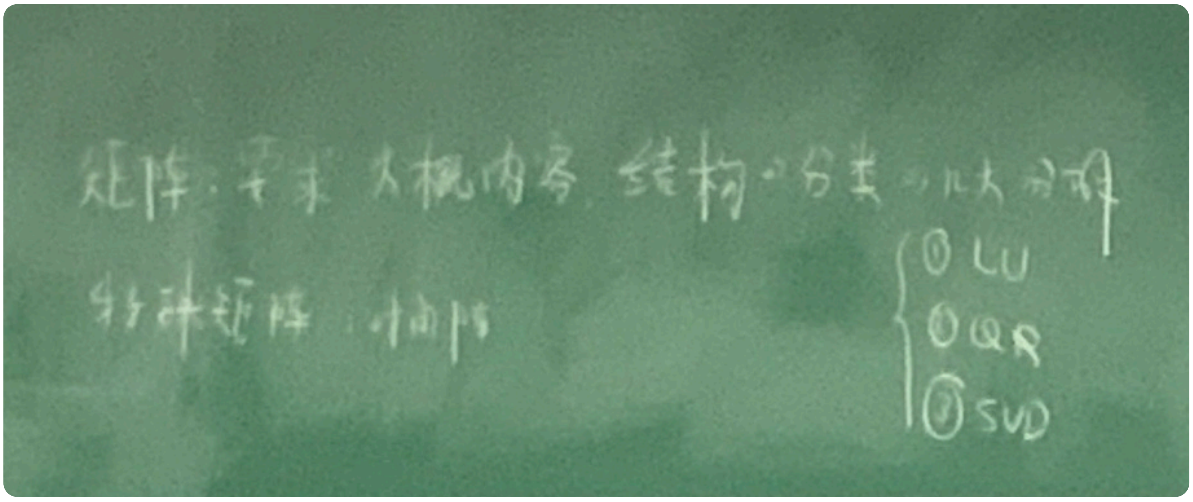
辛普森方法.



$$S = \frac{3}{8}(y_1 + 3y_2 + 3y_3 + y_4)$$

代码 BLAS

Review




技巧　Mathematica 简记

$$H = -\xi\sigma, \quad \sigma = \pm 1.$$

$\xi$ 无序 $\int P(\xi)\,d\xi = 1.$

$$Z = e^{-\beta\xi} + e^{\beta\xi} = e^{-\beta F}$$

$$\Longleftrightarrow \quad F(\xi) = \frac{1}{\beta}\ln\left(e^{-\beta\xi} + e^{\beta\xi}\right)$$

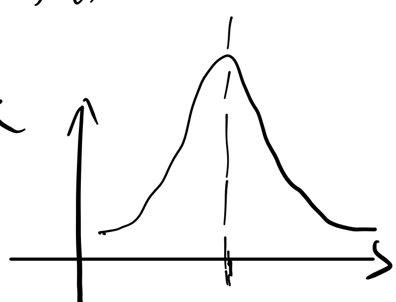
$$I = \int \ln(e^{-x} + e^{x})\, e^{-\alpha x^2}\, dx$$ ，求积分.

$$= \int f(x)\, dx$$

数值求解.

NIntegrate.

f(x) 的图像

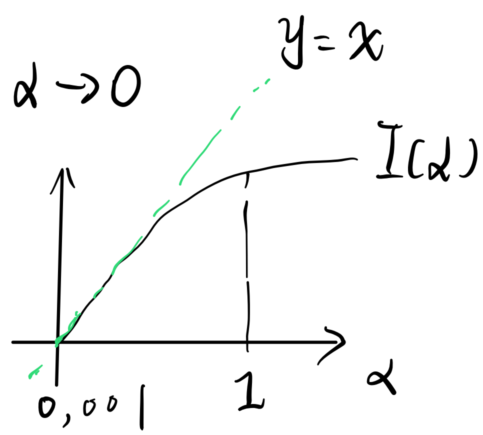


局域在 0 附近

$$I \simeq \int \ln(1+1) e^{-\alpha x^2} dx = \ln 2 \int e^{-\alpha x^2} dx$$
$$= \ln 2 \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{1/2}$$

$\Uparrow$

一个近似的解析表达式.




猜测

$$f(\alpha) = \beta_0 + \beta_1 \alpha + \beta_2 \alpha^2 + \cdots$$

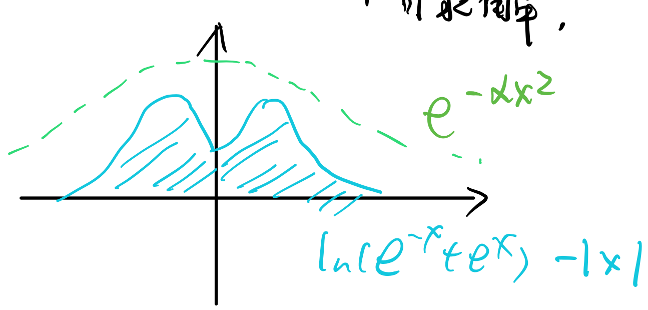
$$\begin{cases} \beta_1 = 1 \\ \beta_0 = \left(\frac{\pi^2}{12}\right) \end{cases}$$

$\alpha \to 0$ $\begin{cases} \text{如何解析计算.} \\ \text{Mathematical 辅助.} \end{cases}$

$$I(\alpha) = \int dx \left(\ln(e^{-x} + e^{x}) - |x|\right) e^{-\alpha x^2} + \int dx\, |x| e^{-\alpha x^2}$$

$$= I_1(\alpha) + I_2(\alpha)$$

$\uparrow$ 可求解.




$\alpha \to 0$ $\Rightarrow I_1(\alpha) \simeq 2\int_0^{+\infty} \left[\ln(e^{x} + e^{-x}) - x\right] dx$

$$= 2\int_0^{+\infty} \left\{\ln\left[e^{x}(1+e^{-2x})\right] - x\right\} dx \quad \Leftarrow \text{x很小时}$$

$$\simeq 2\int_0^{+\infty} \ln(1+e^{-2x}) dx$$

$$\ln(1+x) = \sum_{n=1} (-1)^{n-1} \frac{x^n}{n}$$

$$= 2\int_0^{+\infty} \sum (-1)^{n-1} \frac{e^{-2nx}}{n} dx.$$

$$= 2\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{n-1}}{n} \int_0^{+\infty} e^{-2nx} dx = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \frac{1}{2n}$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n^2} = \frac{\pi^2}{12}$$

高阶

$$\int_0^{+\infty} \ln(1+e^{-2x}) e^{-\alpha x^2} dx$$

$$= \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{n-1}}{n} \int_0^{+\infty} e^{-2nx} (1-\alpha x^2+\frac{\alpha^2}{2}x^4+\cdots) dx$$

$$\int_0^{+\infty} e^{-\alpha x^2} x^n dx = (\frac{\alpha^{n-1}}{n!})$$

总结：①数值拟合

②猜测

③极限下讨论

物理＝数学＋模型＋近似

矩阵：三对角阵 $\begin{cases} O(N^2)，计算时间 \\ O(N)，内存 \end{cases}$

Lanczos 方法 $H \to$ 三对角矩阵.

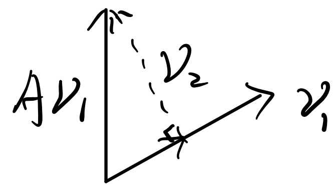
求 A 的本征值，$A_{n\times n}$，n 相当大

表示矩阵的方式。$\begin{cases} Au_n = \lambda_n u_n & \text{，数学} \\ A|u_n\rangle = \lambda_n|u_n\rangle & \text{，量子力学。} \end{cases}$

Lanczos Methods.

选取一个矢量 $v_1$

$$Av_1 = \alpha_1 v_1' + \beta_1 v_2$$




$$\begin{cases} v_1^{\dagger} \cdot v_2 = 0 \\ v_1 \cdot v_1 = 1 \\ v_2 \cdot v_2 = 1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} v_1^{\dagger} A v_1 = \alpha_1 \\ v_2^{\dagger} A v_1 = \beta \end{cases}$$

$$Av_2 = \gamma_1 v_1 + \alpha_2 v_2 + \beta_2 v_3$$

$$Av_n = \gamma_{n-1} v_{n-1} + \alpha_n v_n + \beta_n v_{n+1}$$

$\forall\, n \geq 2$，只和 $v_{n-1}, v_n$ 正交，从而产生一个新的矢量 $v_{n+1}$。

类比

$$HX = EX \qquad \gamma_{n-1} v_{n-1} + \alpha_n v_n + \beta_n v_{n+1} = Av_n$$

$$\sum_j H_{ij} X_j = E X_i \qquad X_i \to v_i$$

$$\Rightarrow A = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & \gamma_{n-1} & \alpha_n & \beta_n & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

只需要存下 $\{\gamma_{n-1}, \alpha_n, \beta_n\}$ 即可。（只关心矩阵的谱）

求 H 的本征值. or 微分方程的本征值. 目标 (求任意 $V(x,y)$ 的方程)

e.g.

$$\left\{-\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right\}\psi(x)=E\psi(x)$$

① 离散化.

$$\psi(x)\Rightarrow\psi_i=\psi(x_i)$$

数值计算第一步

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right]\psi(x)=E\psi(x)$$ ⇐ 对方程无量纲化

$x=\tilde{x}a$ $a$ 长度量纲.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2ma^2}\frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2}+V(\tilde{x})\right]\psi(\tilde{x})=E\psi(\tilde{x})$$

$$E=\tilde{E}\frac{\hbar^2}{ma^2}$$ . 可以这样选取, 但不唯一.

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2}+\tilde{V}(\tilde{x})\right]\psi(\tilde{x})=\tilde{E}\psi(\tilde{x})$$ ⇐ 无量纲后的方程.

$$\frac{\partial}{\partial x}\psi(x_i)=\lim_{h\to 0}\frac{\psi(x_i+h)-\psi(x_i)}{h}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x_i)=\lim_{h\to 0}\frac{\psi(x_i+h)+\psi(x_i-h)-2\psi(x_i)}{h^2}$$

$$\Rightarrow\left[-\frac{1}{h^2}(\psi_{i+1}+\psi_{i-1}-2\psi_i)+\tilde{V}(x_i)\psi_i\right]=\tilde{E}\psi_i$$

$h\to 0$. 动 解 变成了无穷大的维数.

如何理解,

Actually, 解是收敛的.