1 正交多项式

定义函数之间的内积为 $\langle f|g\rangle = \int_a^b f(x)g(x)\rho(x)\,\mathrm{d}x$。在第五讲中我们知道，在给定积分区间 (a,b) 和权函数 $\rho(x)$ 后，其上存在正交归一的多项式 $\{Q_n(x)\}$，满足

$$\langle Q_i|Q_j\rangle = \delta_{ij}, \tag{1}$$

以及

$$\langle Q_n|x^m\rangle = 0, \quad m < n. \tag{2}$$

例如，对于区间 $(-1,1)$ 上的 $\rho(x)=1$，正交多项式为归一化的勒让德多项式 $\sqrt{\frac{2n+1}{2}}P_n(x)$。为方便起见，在下文所有的正交多项式都以内积来确定归一化常数，而非文献中常见的定义。

正交多项式的零点可以用于构造高斯积分的格点。但问题在于，我们如何获得正交多项式？将幂函数组 $\{x^n\}$ 直接做 Gram-Schmidt 正交化即可：选取起点为常函数 $Q_0(x) = 1/\sqrt{\langle 1|1\rangle}, n=0$；进行递归

- $\gamma_{i,n} = \langle Q_i|xQ_n\rangle\,, \quad i = 0,1,\ldots n$
- $V_n(x) = xQ_n(x) - \sum_{i=0}^{n}\gamma_{i,n}Q_i(x)$
- $\alpha_n = \sqrt{\langle V_n|V_n\rangle}$
- $Q_{n+1}(x) = V_n(x)/\alpha_n$
- $n = n+1$

试证明

(1.1) 这样得到的函数组满足(1)式与(2)式；

(1.2) 对于 $i = 0,1,\ldots,n-2$，有 $\gamma_{i,n} = 0$；

(1.3) $\alpha_{n-1} = \gamma_{n-1,n}$。

记 $\beta_n = \gamma_{n,n}$，我们有三项递归关系 $\alpha_n Q_{n+1}(x) = (x-\beta_n)Q_n(x) - \alpha_{n-1}Q_{n-1}(x)$ 成立。这个三项递归关系事实上给出了类似于第六讲介绍过的秦九韶算法的计算多项式的方案。试利用该递归关系，计算

(2.1) $x = 0.5$ 处，$n = 2, 16, 128, 1024$ 阶的勒让德多项式 $P_n(x)$ 与拉盖尔多项式 $L_n(x)$ 的函数值。

该三项递归关系可以形式上写成

$$x\begin{pmatrix} Q_0(x) \\ Q_1(x) \\ Q_2(x) \\ \vdots \\ Q_{n-1}(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta_0 & \alpha_0 & 0 & \cdots & 0 \\ \alpha_0 & \beta_1 & \alpha_1 & \cdots & 0 \\ 0 & \alpha_1 & \beta_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & & \beta_{n-1} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} Q_0(x) \\ Q_1(x) \\ Q_2(x) \\ \vdots \\ Q_{n-1}(x) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \alpha_{n-1}Q_n(x) \end{pmatrix} \tag{3}$$

容易检验，$Q_n(x)$ 的全部 n 个零点正是三对角矩阵

$$\mathbf{X} \equiv \begin{pmatrix} \beta_0 & \alpha_0 & 0 & \cdots & 0 \\ \alpha_0 & \beta_1 & \alpha_1 & \cdots & 0 \\ 0 & \alpha_1 & \beta_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & & \beta_{n-1} \end{pmatrix} \tag{4}$$

的全部本征值。这同第八讲中介绍的对称三对角矩阵与多项式零点之间的关系是对应的。那么，试

(2.2) 求解 $n=1024$ 阶厄密多项式 $H_n(x)$ 以及切比雪夫多项式 $T_n(x)$ 升序排列的第 $2,16,128,1024$ 个零点，分别使用 QR 算法、二分法和分治法，比较不同算法之间的时间消耗。注意切比雪夫多项式的零点是解析已知的，你可以用其来检验算法的正确性。

容易检验这个三对角矩阵对应本征值 x_j 的本征向量为 $\{w_j Q_i(x_j)\}$，其中 w_j 是归一化系数。试

(2.3) 证明多项式 $f_j(x) \equiv \sum_{i=0}^{n} Q_i(x_j)Q_i(x)$ 正是第五讲中所引入的高斯节点上的插值多项式（至多差一个归一化常数）。并据此在上一问的基础上，给出相应零点的权值 A_j 并画出 $\sqrt{\rho(x)/\rho(x_j)}f_j(x)$ 的图像。

我们可以站在略高一点的视角来看待这个问题。将定义在区间 (a,b) 上全体在权函数 $\rho(x)$ 下平方可积的函数看作是一个赋范线性空间 L^2（如果你愿意的话，可以叫希尔伯特空间），x 乘上任意函数构成了 L^2 中的一个线性映射，在某个基底下写开就是一个矩阵。那么容易检验，我们构造正交多项式的过程，实际上就是取初始向量 $\boldsymbol{v}_0$ 为常函数，构造关于坐标算符 $\hat{x}$ 的 Krylov 子空间的过程。原则上讲 $x \in (a,b)$ 的全体实数都是坐标算符 $\hat{x}$ 的本征值，相应的本征向量 $|x\rangle$ 满足 $\langle x|y\rangle = \delta(x-y)$。

(3.1) 以区间 $(-1,1)$，权函数 $\rho(x)=1$ 为例，利用前面各问得到的结果，绘制合适的图表，检验 $n\to\infty$ 时，我们通过 Krylov 子空间得到的结果确实能够逼近连续极限。

(3.2) 量子力学的核心公式之一是正则对易关系 $[x,-\frac{d}{dx}] \equiv -x\frac{d}{dx}+\frac{d}{dx}x = \mathbf{I}$，其中 $\mathbf{I}$ 是单位算符。容易证明，这个关系是不可能在有限维空间中严格成立的。请在有限维 Krylov 子空间中坐标基矢下，计算对易子 $[x,-\frac{d}{dx}]$。它与单位算符的差是怎样随子空间维度 n 变化的？

如下公式在解题过程中可能是有用的：

勒让德多项式，积分区间 $(-1,1)$，权函数 $\rho(x)=1$，满足递归关系

$$xP_n(x) = \frac{n}{\sqrt{(2n-1)(2n+1)}}P_{n-1}(x) + \frac{n+1}{\sqrt{(2n+1)(2n+3)}}P_{n+1}(x), \tag{5}$$

$$P_n(x) = \sqrt{\frac{2n+3}{2n+1}}P'_{n+1}(x) - \sqrt{\frac{2n-1}{2n+1}}P'_{n-1}(x). \tag{6}$$

拉盖尔多项式，积分区间 $(0,\infty)$，权函数 $\rho(x)=\mathrm{e}^{-x}$，满足递归关系

$$xL_n(x) = (2n+1)L_n(x) - nL_{n-1}(x) - (n+1)L_{n+1}(x), \tag{7}$$

厄密多项式，积分区间 $(-\infty,\infty)$，权函数 $\rho(x)=\mathrm{e}^{-x^2}$，满足递归关系

$$xH_n(x) = \sqrt{\frac{n+1}{2}}H_{n+1}(x) + \sqrt{\frac{n}{2}}H_{n-1}(x) \tag{8}$$

切比雪夫多项式，积分区间 $(-1,1)$，权函数 $\rho(x)=\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$，满足递归关系（注意 T_0 和其余 T_n 的归一化系数不同）

$$\begin{aligned} xT_n(x) &= \frac{1}{2}T_{n+1}(x) + \frac{1}{2}T_{n-1}(x), \quad n\geq 1 \\ T_0(x) &= 1, \quad T_1(x) = x \end{aligned} \tag{9}$$

零点与权值的解析表达式为

$$x_i = \cos\left(\frac{2i-1}{2n}\pi\right), A_i = \frac{\pi}{n}, \quad i=1,\ldots,n \tag{10}$$

Christoffel-Darboux 公式：从(3)式出发容易证明，正交归一多项式组 $\{Q_n(x)\}$ 满足

$$\sum_{j=0}^{n} Q_j(x)Q_j(y) = \alpha_n \frac{Q_n(y)Q_{n+1}(x) - Q_{n+1}(y)Q_n(x)}{x-y}, \tag{11}$$

$$\sum_{j=0}^{n} Q_j(x)Q_j(x) = \alpha_n\left[Q_n(x)Q'_{n+1}(x) - Q_{n+1}(x)Q'_n(x)\right]. \tag{12}$$