计算物理第三次作业

2000012425 张弛

2022 年 11 月 11 日

1.假设积分区间$[0,\infty]$，权函数为$exp{-x}$，请计算给出前三项正交多项式（即 $p0,p1,p2$,其中$p2$为二阶多项式），并给出$p2$对应的高斯点的值$x1$和$x2$；利用$x1$ 和$x2$，来计算积分$\infty_0^\infty \ln 1-e^{-x} dx$（权重因子可以推导或查文献）

解. 前三项正交多项式是方便的，直接施密特正交化即可。

$$\begin{aligned}
&p_0 = 1,\\
&p_1 = x - \frac{(x,p_0)}{(p_0,p_0)}p_0 = x-1,\\
&p_2 = x^2 - \frac{(x^2,p_0)}{(p_0,p_0)}p_0 - \frac{(x^2,p_1)}{(p_1,p_1)}p_1 = x^2-4x+2.
\end{aligned}$$

对应p_2的高斯点为其两个零点

$$x_1 = 2-\sqrt{2}, x_2 = 2+\sqrt{2}.$$

下面求积分参数，列出两个方程即可

$$\begin{aligned}
A_0 + A_1 &= 1,\\
(2-\sqrt{2})A_0 + (2+\sqrt{2})A_1 &= 1.
\end{aligned}$$

解得

$$A_0 = \frac{2+\sqrt{2}}{4}, A_1 = \frac{2-\sqrt{2}}{4}.$$

那么高斯积分法

$$I_1 = A_0 f(x_1) + A_1 f(x_2).$$

其中

$$f(x) = \ln{(1-e^{-x})}e^x.$$

计算得到

$$I_1 = -1.39617.$$

这误差不小，准确值为$-\frac{\pi^2}{6} = -1.64439$.

2.利用梯形法则、辛普森法则以及Gauss-Chebyshev方法，给出下面积分的数值结果：

$$\int_1^{100} exp(-x)/x dx$$

其中梯形法则、辛普森法的格点数分别为$10,100,1000$(格点包括左右端点)。Gauss-Chebyshev方法格点数为$10,100$。

解. 对于积分段$[a,b]$，梯形法则

$$P_1(x) = \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)].$$

辛普森法则

$$P_2(x) = \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right].$$

将区间$[1,100]$分成*9*段，*99*段，*999*段，对每一段使用梯形法则、辛普森法则。借助程序“*HW3*计物第二题*Newton.py*”得到如下结果

n	10	100	1000
梯形法则	2.023e+00	2.747e-01	2.200e-01
Simpson	6.761e-01	2.208e-01	2.194e-01

表 1: 梯形法则与辛普森法则积分公式结果

对于*Gauss-Chebyshev*方法，先令

$$t = \frac{2}{99}x - \frac{101}{99}, x = \frac{99}{2}t + \frac{101}{2}, dx = \frac{99}{2}dt.$$

那么积分变为

$$\frac{99}{e^{101/2}}\int_{-1}^{1}\frac{e^{-99/2t}}{99t+101}dt.$$

考虑使用的正交多项式是*Chebyshev*多项式，认为被加权积分的函数是

$$f(x) = \frac{99}{e^{101/2}}\frac{e^{-99/2x}}{99x+101}\sqrt{1-x^2}.$$

认为*Chebyshev*多项式形式已知，高斯积分节点x_i已知，权重ω_i通过解线性方程组

$$\sum_{i=1}^{n} p_k(x_i)\omega_i = \begin{cases}(p_0, p_0) = \pi, k = 0\\ 0, k = 1, 2, \cdots, n-1\end{cases}$$

得到。具体节点和权重不列出了。最后的结果相当于

$$I = \int_{1}^{100} exp(-x)/x dx = \int_{-1}^{1} f(x)\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}dx = \sum_{i=1}^{n}\omega_i f(x_i).$$

借助程序“*HW3*计算物理第二题*Gauss.np*”计算得到如下结果

n	10	100
Gauss-Chebyshev	3.042e-01	2.201e-01

表 2: Gauss-Chebyshev方法结果

最终结果与前两种方法大致相同。

3.利用二分法、牛顿-Raphson法以及割线法，求解下列方程的正根：

$$x^2 - 4x\sin x + (2\sin x)^2 = 0.$$

解. 先处理一下

$$x = 2\sin x.$$

对二分法，记

$$f(x) = x - 2\sin x.$$

确信

$$f(1) < 0, f(2) > 0.$$

则初始边界设为

$$a = 1, b = 2.$$

精度取到小数点后六位。借助程序“*HW3*计物第三题二分法*.py*”得到结果

$$x = 1.895493984e + 00.$$

对*Newton-Ralphson*方法，依旧使用上面的$f(x)$，导数

$$f'(x) = 1 - 2\cos x.$$

初始取$x_0 = 1$是合适的。取精度限制$|f(x)| < 1e - 6$以及$|x_k - x_{k+1}| < 1e - 6$。借助程序“*HW3*计物第三题*NR.py*”得到如下结果

$$x = 1.895494267e + 00.$$

结果和二分法很一致，在小数后六位出现不一致。

对割线法，几乎完全和上面一样。取初始

$$x_1 = 0.9, x_2 = 1$$

借助程序“*HW3*计物第三题割线法*.py*”得到如下结果

$$x = 1.895494267e + 00.$$

结果和*Newton-Ralphson*方法很一致。