计算物理第三次作业　作业解答

隋源　2000011379

Nov 19th 2022

1. 正交多项式的 Gauss 积分法

由权函数 $\omega(x) = e^{-x}$，在区间 $[0, +\infty)$ 很容易定义积分

$$I_n = \int_0^\infty e^{-x} x^n \mathrm{d}x = n!, \quad n \in \mathbb{N}$$

根据 Gram-Schmidt 正交化方法，初始条件

$$p_{-1} = 0, \quad p_0 = 1, \quad \gamma_1^2 = 0$$

依次计算

$$\delta_1 = \frac{(xp_0, p_0)}{(p_0, p_0)} = \frac{I_1}{I_0} = 1$$
$$p_1 = (x - \delta_1)p_0 - \gamma_1^2 p_{-1} = x - 1$$
$$\delta_2 = \frac{(xp_1, p_1)}{(p_1, p_1)} = \frac{I_3 - 2I_2 + I_1}{I_2 - 2I_1 + I_0} = 3$$
$$\gamma_2^2 = \frac{(p_1, p_1)}{(p_0, p_0)} = \frac{I_2 - 2I_1 + I_0}{I_0} = 1$$
$$p_2 = (x - \delta_2)p_1 - \gamma_2^2 p_0 = x^2 - 4x + 2$$

由此前三项正交多项式的表达式为

$$p_0 = 1, \quad p_1 = x - 1, \quad p_2 = x^2 - 4x + 2$$

利用 $p_2 = 0$ 得到 Gauss 点

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

计算权重因子的方程组

$$p_0(x_1)\omega_1 + p_0(x_2)\omega_2 = (p_0, p_0)$$
$$p_1(x_1)\omega_1 + p_1(x_2)\omega_2 = 0$$

代入得到

$$\omega_1=\frac{2+\sqrt{2}}{4},\quad \omega_2=\frac{2-\sqrt{2}}{4}$$

令 $f(x)=e^x\ln(1-e^{-x})$，利用 Gauss 积分法计算

$$\int_0^{\infty} e^{-x}f(x)\mathrm{d}x\approx\omega_1 f(x_1)+\omega_2 f(x_2)=-1.39617$$

2. 不同方法求数值积分

待求积分

$$I=\int_1^{100}\frac{1}{xe^x}\mathrm{d}x=\int_a^b f(x)\mathrm{d}x$$

假设分为 N 个区间 (共 N+1 个点)，令 $h=(b-a)/N$，梯形法则给出的结果是

$$I\approx\frac{h}{2}[f(a)+f(b)]+h\sum_{k=1}^{N-1}f\left(a+kh\right)$$

辛普森法则给出的结果 (此时 N 须为偶数)

$$I\approx\frac{h}{3}[f(a)+f(b)]+\frac{2h}{3}\sum_{k=1}^{N-1}f\left(a+2kh\right)+\frac{4h}{3}\sum_{k=1}^{N}f\left(a+(2k-1)h\right)$$

如果要用 Chebyshev 多项式，需改写积分。令

$$x=\frac{99t+101}{2}=kt+b$$

则

$$I=\int_{-1}^{1}\frac{1}{\sqrt{1-t^2}}\frac{k\sqrt{1-t^2}}{(kt+b)e^{kt+b}}\mathrm{d}t=\int_{-1}^{1}\omega(t)f(t)\mathrm{d}t$$

Gauss-Chebyshev 积分公式给出的结果 (为与前两种对比，取 N+1 个 Gauss 点)

$$I\approx\frac{\pi}{N+1}\sum_{k=0}^{N}f\left(\cos\frac{2k+1}{2N+2}\pi\right)$$

分别计算 $N=10,100,1000$ 时三种方法给出的积分结果列入下表 (计算结果由 integrate.py 给出)

N	10	100	1000
Trapezoidal	1.82102000	0.27372391	0.21998408
Simpson	1.21402451	0.23127916	0.21938700
Gauss-Chebyshev	0.30187930	0.22012431	0.21939141

显然收敛速度 G-C>S>T。为了直观感受，利用 N 等于 $[1,2000]$ 的范围内的偶数的数据作图如下

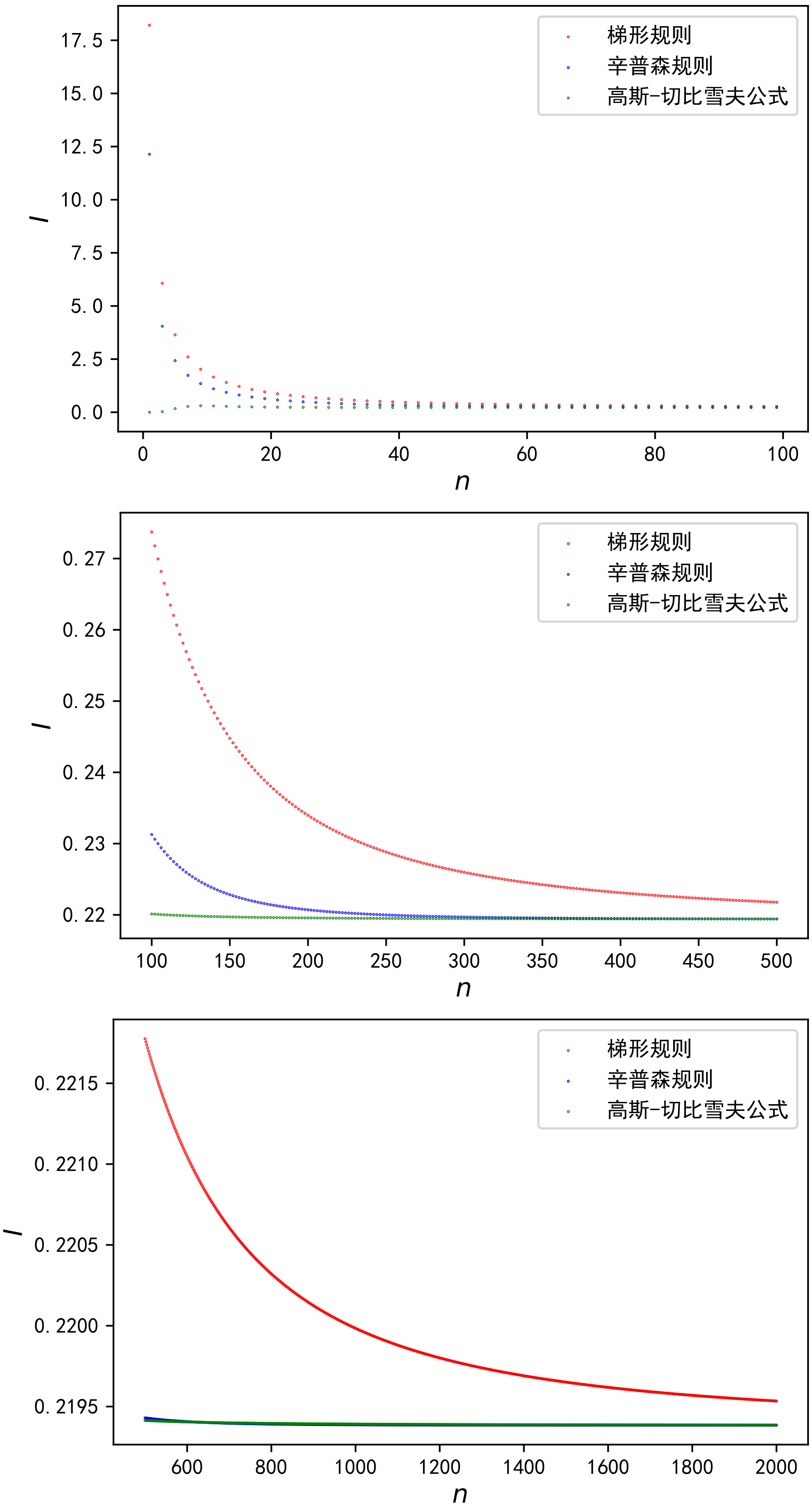


图 1: 梯形规则、辛普森规则、高斯-切比雪夫公式的收敛速度（从上到下分别为 1-50，50-500，500-2000 的数据图）

3. 不同方法求方程正根

待解方程

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

令

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

$$f'(x) = 2x - 4\sin x - 4x\cos x + 8\sin x\cos x$$

发现 f(x) 的零点是不变号零点 (如图 2 所示)，不满足二分法 $f(a)f(b) < 0$ 的条件，只能用 Newton-Raphson 法和割线法。因为要求正解，可改写方程

$$4\left(\frac{\sin x}{x}\right)^2 - 4\frac{\sin x}{x} + 1 = 0$$

因此这是一个二次零点，值由下式给出

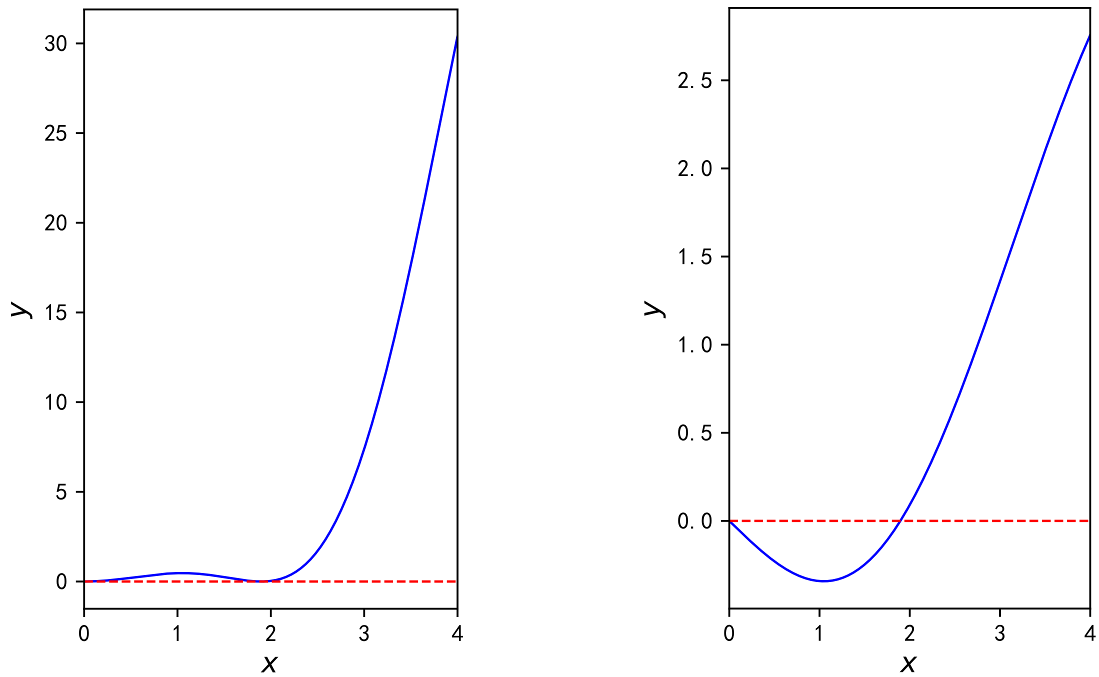
$$\frac{\sin x}{x} = \frac{1}{2}$$

令

$$g(x) = \frac{1}{2}x - \sin x$$

$$g'(x) = \frac{1}{2} - \cos x$$

这样就可以用二分法了。两个函数图如下



f(x)（左）和 g(x)（右）的函数图像

因为 $x>0$ 时 $f(x)>x^2-4x$，因此 $f(x),g(x)$ 图中的零点即为所求。二分法、Newton-Raphson 法和割线法的迭代方程依次为

$$x_{n+1}=\frac{a_n+b_n}{2}$$

$$x_{n+1}=x_n-\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

$$x_{n+1}=x_n-\frac{\delta f(x_n)}{f(x_n)-f(x_n-\delta)}$$

程序中取 $a_0=1,b_0=4,x_0=b_0,\delta=0.001$，判定范围为 $y<10^{-10}$。将计算结果列入下表 (计算结果由 equation.py 给出)

$x_0=$	Bisection	Newton-Ralphson	Secant
$f(x)$	/	1.895497484005	1.895488167550
$g(x)$	1.895494267053	1.895494267048	1.895494267035

由此可见改写后的 $g(x)$ 结果更精准。