

计算物理第二次作业

- 请提交一个 PDF 格式的作业解答, 其中可以描述相应的解题步骤, 必要的图表等 (建议用 LaTeX 进行排版)。
- 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、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。
- 所有文件打包为压缩文件夹后发送到课程的公邮 (num_phys2022@163.com)。压缩包的文件名和邮件题目请取为“学号 + 姓名 + 第几次作业”。作业收到后自动回复。

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

$$0.05x_1 + 0.07x_2 + 0.06x_3 + 0.05x_4 = 0.23$$

$$0.07x_1 + 0.10x_2 + 0.08x_3 + 0.07x_4 = 0.32$$

$$0.06x_1 + 0.08x_2 + 0.10x_3 + 0.09x_4 = 0.33$$

$$0.05x_1 + 0.07x_2 + 0.09x_3 + 0.10x_4 = 0.31$$

请将两种方法的计算结果以及 Cholesky 分解得到的上三角矩阵写到答案文档中。

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。

注: 本题要求解析计算, 请写明计算步骤和插值后得到的 $f(x)$ 的表达式, 保留至少五位有效数字。

3. 在区间 $[1, 2]$ 内利用 0-4 阶和 0-6 阶 Chebyshev 多项式展开 $\log_2(x)$, 对结果和误差作图并分析。

4. 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:

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

然后构造 $f(x)$ 在 $[-1, +1]$ 上的近似式,

$$f(x) \approx C(x) \equiv -\frac{c_0}{2} + \sum_{k=0}^{19} c_k T_k(x) \quad (1)$$

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。

5. 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) $i = 0, 1, \dots, n$ 。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 $t_i = 0, 1, \dots, n$, 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

$$S_\Delta(X; t_i) = x_i, \quad S_\Delta(Y; t_i) = y_i \quad (2)$$

这两个样条函数可以看做是 $(x(t), y(t))$ 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

$$r(\phi) = 2a(1 - \cos \phi) = 1(1 - \cos \phi) \quad (3)$$

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)。