

Computational Physics(A)

Assignment 2

Chon Hei Lo*(罗俊熙)

School of Physics, Peking University

November 23, 2023

注 1: 此作业的解答如无说明, 统一使用爱因斯坦求和约定。

1 Problems & Solutions

1.1 Chebyshev 近似 (15pt)

给出 $f(x)$ 的 3 阶和 5 阶的 Chebyshev 近似展开, 讨论及作图比较。

$$f(x) = x^6 + 3x^5 + 4x^4 + \frac{1}{3}x^3 + 2x^2 + x - 10, \quad (-1 \leq x \leq 3)$$

Solution: 为了将定义域 $[-1, 3]$ 映射到 $[-1, 1]$, 令 $y = \frac{x-1}{2}$ 。对于 3 阶来说, 有:

$$\begin{aligned} c_0^{(4)} &= \frac{1}{4} \sum_{k=0}^3 f \left[2 \cos \left(\frac{\pi(k+1/2)}{4} \right) + 1 \right] \\ c_1^{(4)} &= \frac{2}{4} \sum_{k=0}^3 \cos \left(\frac{\pi(k+1/2)}{4} \right) f \left[2 \cos \left(\frac{\pi(k+1/2)}{4} \right) + 1 \right] \\ c_2^{(4)} &= \frac{2}{4} \sum_{k=0}^3 \cos \left(\frac{2\pi(k+1/2)}{4} \right) f \left[2 \cos \left(\frac{\pi(k+1/2)}{4} \right) + 1 \right] \\ c_3^{(4)} &= \frac{2}{4} \sum_{k=0}^3 \cos \left(\frac{3\pi(k+1/2)}{4} \right) f \left[2 \cos \left(\frac{\pi(k+1/2)}{4} \right) + 1 \right] \end{aligned}$$

使用程序 3-1.py 计算得到:

$$c_0^{(4)} = 369.3$$

*Email: see.looooo@stu.pku.edu.cn; StudentID: 2000012508

$$c_1^{(4)} = 664.0$$

$$c_2^{(4)} = 444.0$$

$$c_3^{(4)} = 204.7$$

又有 $T_0(y) = 1, T_1(y) = y, T_2(y) = 2y^2 - 1, T_3(y) = 4y^3 - 3y$ 所以

$$\begin{aligned} S(x) &= \sum_{m=0}^3 c_m^{(4)} T_m\left(\frac{x-1}{2}\right) \\ &= 369.3 + 664.0\left(\frac{x-1}{2}\right) + 444.0\left[2\left(\frac{x-1}{2}\right)^2 - 1\right] + 204.7\left[4\left(\frac{x-1}{2}\right)^3 - 3\left(\frac{x-1}{2}\right)\right] \\ &= 102.35x^3 - 85.05x^2 - 112.0x + 20.0 \end{aligned}$$

注，由於 $c^{(4)m}$ 都進行了四捨五入，所以最後的結果可能會有一點誤差。

對於 5 階來說，有：

$$\begin{aligned} c_0^{(6)} &= \frac{1}{6} \sum_{k=0}^5 f\left[2 \cos\left(\frac{\pi(k+1/2)}{6}\right) + 1\right] \\ c_1^{(6)} &= \frac{2}{6} \sum_{k=0}^5 \cos\left(\frac{\pi(k+1/2)}{6}\right) f\left[2 \cos\left(\frac{\pi(k+1/2)}{6}\right) + 1\right] \\ c_2^{(6)} &= \frac{2}{6} \sum_{k=0}^5 \cos\left(\frac{2\pi(k+1/2)}{6}\right) f\left[2 \cos\left(\frac{\pi(k+1/2)}{6}\right) + 1\right] \\ c_3^{(6)} &= \frac{2}{6} \sum_{k=0}^5 \cos\left(\frac{3\pi(k+1/2)}{6}\right) f\left[2 \cos\left(\frac{\pi(k+1/2)}{6}\right) + 1\right] \\ c_4^{(6)} &= \frac{2}{6} \sum_{k=0}^5 \cos\left(\frac{4\pi(k+1/2)}{6}\right) f\left[2 \cos\left(\frac{\pi(k+1/2)}{6}\right) + 1\right] \\ c_5^{(6)} &= \frac{2}{6} \sum_{k=0}^5 \cos\left(\frac{5\pi(k+1/2)}{6}\right) f\left[2 \cos\left(\frac{\pi(k+1/2)}{6}\right) + 1\right] \end{aligned}$$

使用程序 **3-1.py** 計算得到：過程略，結果如下：

$$S(x) = 9x^5 - 5x^4 - 3.67x^3 + 14x^2 + x - 12.0$$

1.2 Pade 近似 (15pt)

給出 $f(x) = e^x$ 的 $(2, 2)$ 階 Pade 近似。

Solution: 先對 $f(x)$ 用泰勒展開得到 $c_0 = 1, c_1 = 1, c_2 = \frac{1}{2}, c_3 = \frac{1}{6}, c_4 = \frac{1}{24}$ ，利用課件公式，有：

$$b_1 c_2 + b_2 c_1 = -c_3$$

$$b_1 c_3 + b_2 c_2 = -c_4$$

$$b_0 c_1 + b_1 c_0 = a_1$$

$$b_0 c_2 + b_1 c_1 + b_2 c_0 = a_2$$

解得 $b_1 = -\frac{1}{2}, b_2 = \frac{1}{12}, a_1 = \frac{1}{2}, a_2 = \frac{1}{12}$ 。所以有

$$R(x) = \frac{1 + \frac{x}{2} + \frac{x^2}{12}}{1 - \frac{x}{2} + \frac{x^2}{12}}$$

1.3 数值积分 (35pt)

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

$$\int_1^{100} \frac{e^{-x}}{x} dx$$

其中梯形法则、辛普森法的格点数分别取取为 10, 100, 1000（格点包括左右端点）。Gauss Legendre 方法格点数为 10, 100，Gauss-Legendre 节点和权重因子可以查阅文献或者调用已有的库函数，不用推算。

注：要求程序明确输出，并在答案文档中明确写出这几种情况下的计算结果，至少保留五位有效数字。

Solution:

1.4 样条函数在计算机绘图中的运用

Solution:

1.5 对称矩阵特征值问题

Solution: