

# 《计算物理学》讲义

## 总结与回顾

彭良友

北京大学物理学院现代光学所

Email: [liangyou.peng@pku.edu.cn](mailto:liangyou.peng@pku.edu.cn)

2019年5月31日

# 本课程所学的内容

- 第一讲：数值分析基础.
- 第二讲：线性方程组的直接求解.
- 第三讲：线性方程组的迭代解法.
- 第四讲：插值法及其数值计算.
- 第五讲：数值微分和数值积分.
- 第六讲：非线性方程求根与函数极值.
- 第七讲：矩阵的特征值问题(上).
- 第八讲：矩阵的特征值问题(下).
- 第九讲：蒙卡方法和数据的处理及拟合.
- 第十讲：函数逼近、傅里叶变换、小波变换.
- 第十一讲：常微分方程初值问题的数值求解.
- 第十二讲：线性微分方程的边值问题.
- 第十三讲：偏微分方程的数值求解(上)—抛物型.
- 第十四讲：偏微分方程的数值求解(下)—双曲型.
- 第十五讲：积分方程数值方法简介.
- 第十六讲：并行计算简介.

# 第一讲 数值分析基础 目录

- 前言
- 本课程安排
- 数值计算的研究对象和特点
- 计算复杂度概述
- 常用数学软件资源
- 计算机里的浮点数表示
- 误差的来源及分析
- 条件数和问题的敏感性
- 算法的稳定性
- 减小舍入误差的若干建议
- 微积分知识回顾

---

---

Notes:

## 第二讲 线性方程组的直接求解 目录

- 引言
- 三角形方程组的解法
- 高斯消元法
- 矩阵的直接LU分解
- 三对角方程组的追赶法
- 列主元消元法
- 高斯-若尔当消元法
- 列主元LU分解
- 对称正定矩阵的Cholesky分解
- 一般对称正定带状系数矩阵方程组的算法
- 向量和矩阵的范数、方程组的性态和条件数

---

Notes:

# 第三讲 线性方程组的迭代解法 目录

- 引言
- 雅克比迭代法
- 收敛条件讨论
- 高斯-赛德尔迭代法
- 超松弛迭代法
- 三种经典迭代法收敛判定
- 最速下降法
- 共轭梯度法
- 例子：二维拉普拉斯方程求解
- 数值求解线性方程组总结

---

Notes:

## 第四讲 插值法及其数值计算 目录

- 引言：函数逼近和插值问题
- 拉格朗日插值
- 逐次线性插值–Aitken法
- 牛顿插值
- 埃尔米特(Hermite)插值
- 分段低阶插值
- 三次样条函数插值

---

Notes:

# 第五讲数值微分和数值积分.

- 数值微分
  - 差商形式的数值微分
  - 插值形式的数值微分
- 数值积分
  - 数值积分概述
  - 插值形式的数值积分
  - 牛顿-柯特斯公式
  - 变步长积分
  - 龙贝格算法
  - 高斯积分
  - 广义积分
  - 蒙特卡洛积分方法

---

Notes:

# 第六讲 非线性方程求根与函数极值 目录

- 非线性方程求根
  - 解的存在性和唯一性
  - 求根的几何方法
    - 二分法(Bisection)
    - 割线法(Secant)
    - 牛顿法(Newton's)
    - 弦切法(Chord)
    - 试位法(Regula Falsi or False Position)
    - Dekker-Brent法
  - 迭代法
    - 简单迭代法
    - 判停标准
    - 加速收敛的后处理技巧: (1) Aitken's加速; (2) Steffensen算法
  - 代数方程求根: (1) Bairstow法; (2) Müller法
  - 非线性方程组求根及有关数值软件
- 优化问题: 函数极值
  - 一维函数的优化: 黄金分割、抛物线、牛顿法
  - 多维函数的优化: 单纯形法、共轭梯度法、牛顿或拟牛顿法

Notes:



# 第七、八讲 矩阵的特征值问题(上、下) 目录

- 特征值问题概述：
  - 基本概念与性质
  - 扰动和敏感性
  - 特征值界限与极值定理
- 矩阵的线性变换：
  - Householder(豪斯霍尔德)变换
  - Givens(吉文斯)旋转变换
  - Gram-Schmidt(格莱姆-斯密特)
- 非对称特征值问题的计算方法：
  - 幂法与反幂法
  - QR算法
- Krylov子空间迭代法：
  - 阿诺尔德(Arnoldi)
  - 兰乔斯(Lanczos)
- 对称特征值问题的计算方法：
  - 对称幂法
  - 对称QR算法
  - 雅克比方法
  - 三对角矩阵的方法：二分法；分而治之
  - 奇异值分解(SVD)：与对称矩阵的谱分解紧密联系
  - 对称广义本征值问题的求解：
    - (1) 楚列斯基-对称QR算法；
    - (2) 兰乔斯算法

Notes:

# 第九讲 蒙卡方法和数据的处理及拟合 目录

- 蒙特卡洛方法基础概述
- 随机数的概念：
  - 真随机数
  - 伪随机数
  - 伪随机数发生器
  - 伪随机数的统计检验
- 任意分布的伪随机变量的抽样：
  - 直接抽样法
  - 变换抽样法
  - 舍选抽样法
  - 复合抽样方法
- 蒙特卡洛在定积分上的计算应用：
  - 投点法
  - 平均值法
  - 中心极限定理
  - 多重定积分
  - 重要抽样法
- 离散数据的拟合：
  - 最大似然拟合
  - 最小二乘拟合
  - 两种拟合的关系

Notes:

# 第十讲 目录函数逼近、傅里叶变换、小波变换 目录

- 函数逼近
  - 正交多项式
  - 最佳一致逼近
  - 最佳平方逼近
  - 最小二乘法
- 傅里叶变换
  - 傅里叶级数
  - 傅里叶变换
  - 抽样信号的傅里叶变换、抽样定理
  - 短时傅里叶变换
- 小波变换
  - 小波变换介绍
  - 小波变换的多分辨分析与Mallat算法
  - 小波变换的应用与问题

# 第十一讲 常微分方程初值问题的数值求解 目录

- 简介
- 欧拉(Euler)方法
- 隆格库塔(Runge-Kutta)/单步算法
- 多步法
- 数值解法的稳定性分析
- 辛算法简介
- 总结

---

---

Notes:

## 第十二讲 线性微分方程的边值问题 目录

- 引言
- 从一维泊松方程出发
- 伽辽金(Galerkin)法
- Monte Carlo方法
- 本征值问题
- 总结

---

---

Notes:

# 第十三讲 目录偏微分方程的数值求解(抛物型) 目录

- 引言
- 误差分析简介：相容性，稳定性，收敛性
- 抛物型方程的真解与差分网格的建立
- 两时间层向前差分显示格式
- 显式格式的 $L^\infty$ 稳定性与 $L^2$ 稳定性
- Richardson格式与Du Fort-Frankel格式
- 隐式差分格式及其稳定性
- Crank-Nicolson格式及 $\theta$ -格式
- 线性多层差分格式
- 半离散化方法
- 边界条件的处理
- 高维情况的差分格式
- 谱方法
- 总结

Notes:

# 第十四讲 偏微分方程的数值求解(双曲型) 目录

- 引言：双曲型偏微分方程
- 特征线，Riemann不变量与特征线法
- CFL条件
- 迎风格式
- Lax-Wendroff格式与Beam-Warming格式
- 蛙跳格式
- 耗散与色散问题
- 初边条件误差的传播
- 对流扩散方程的中心显式格式
- 对流扩散方程的迎风格式，隐式格式与特征差分格式
- 波动方程的显式格式与隐式格式
- 波动方程的等价一阶方程组的差分格式
- 波动方程的交错蛙跳格式与能量守恒性质
- 总结

Notes:

# 第十五讲 积分方程数值方法简介 目录

- 引言
- 第二类Fredholm积分方程的数值求积方法
- 修正的数值求积方法
- 重叠核方法
- 例一：数值求积方法，修正的数值求积方法与重叠核方法的比较
- 近似退化核替代法
- 例二：近似退化核替代法
- 基于解的展开方法
- 特征值问题
- 例子：特征值问题
- 第二类Volterra方程的解
- 总结

---

Notes



# 需要具备的基本能力？

- 绝对误差、相对误差、有效数字的概念；给定解析计算公式，估计误差传播规律
- 数值算法的稳定性，例如设计迭代算法，分析误差传播规律及其稳定性如何
- 数值计算陷阱和减小数值误差的若干小建议
- 线性方程组的直接（如，顺带、逆带、三对角）和迭代（雅克比、高斯赛德尔、SOR）基本算法，迭代法的收敛性判断
- 各种常用的插值方法（拉格朗日、牛顿）、误差分析
- 各种常用的数值微积分方法（梯形积分、辛普森积分、牛顿-科特斯）、收敛性和误差分析、代数精度的定义
- 高斯积分的构造思路和方法
- 非线性方程求根的几何方法(二分法、割线法、牛顿法等)、迭代法（简单迭代、牛顿迭代）
- 矢量、矩阵的范数 $(1, 2, \infty)$ ，及其在线性代数分析中的应用

# 需要具备的基本能力？

- 线性代数里的各种等价变换、消去变换、矩阵的LU分解、矩阵的QR分解
- 求解中等规模矩阵全部本征值的QR算法的基本思想
- 幂法和反幂法的基本算法和运用
- 最小二乘法的思路和算法、实验数据的最小二乘法拟合
- ODE的欧拉方法、Crank-Nicolson、Runge-Kutta法
- 一维泊松方程的边值问题的各种解法（解析、打靶、格林函数、有限差分）
- 一维抛物型偏微分方程的差分显式和隐式格式、泰勒展开的截断误差分析
- 一维双曲型偏微分方程的迎风格式、Lax-Wendroff格式、Beam-Warming格式；截断误差分析

---

Notes: