1-数值求根与优化方法

数值误差

总误差：截断误差 + 舍入误差。截断误差：算法简化，如泰勒展开、迭代终止。

舍入误差：有限精度导致。注意：避免相近数相减、小分母溢出、大数溢出。

求根方法

二分法

条件：$f(a)\cdot f(b)<0$，公式：$c=\frac{a+b}{2}$。

更新：若 $f(a)\cdot f(c)<0$，令 $b=c$，否则 $a=c$。

收敛性：线性。

牛顿法

公式：$x_{i+1}=x_i-\frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$。

优点：平方收敛，收敛快；缺点：需初值好，$f'(x)=0$ 或非常小，以及函数非单调时可能失败

牛顿-二分混合法（Newt-Safe）

1. 定区间 $[a,b]$，确保 $\text{sign}(f(a))\neq\text{sign}(f(b))$。
2. 初始化：$x=\frac{a+b}{2}$。收敛检查：若 $|f(x)|<\epsilon$，则 x 为根，否则继续。
3. 导数检查：若 $f'(x)\neq 0$，用牛顿法：$x_{n+1}=x_n-\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$；否则用二分法缩小区间。
4. 调整区间：根据 $\text{sign}(f(x))$ 调整 $[a,b]$。重复以上步骤至满足收敛条件。

割线法（离散牛顿法）

背景：$f(x)$ 隐式依赖 x 时，$f'(x)$ 难以获得。

公式：$x_{i+1}=x_i-f(x_i)\cdot\frac{x_i-x_{i-1}}{f(x_i)-f(x_{i-1})}$。特点：无需导数，快于二分法但收敛性不保证。

Regula-Falsi 方法（假位法）

背景：包围法，始终调整区间确保根在内。几何和公式类似割线法，但确保 $\text{sign}(f(a))\neq\text{sign}(f(b))$

特点：稳定但收敛慢。

Brent法

混合二分法、割线法和逆二次插值。公式（割线法）：$s=b-f(b)\cdot\frac{b-a}{f(b)-f(a)}$。

公式（逆二次插值）：

$$s=\frac{af(b)f(c)}{(f(a)-f(b))(f(a)-f(c))}+\frac{bf(a)f(c)}{(f(b)-f(a))(f(b)-f(c))}+\frac{cf(a)f(b)}{(f(c)-f(a))(f(c)-f(b))}$$

若插值不稳定则退回二分法。特点：结合稳定性和高效性，适用复杂问题。

收敛性分析

误差：$\varepsilon_t=|x_{\text{true}}-x_{\text{approx}}|$，$\varepsilon_r=\frac{\varepsilon_t}{|x_{\text{true}}|}$。

二分法：线性收敛；牛顿法：平方收敛。

优化方法

最速下降法

公式：$x_{i+1}=x_i-\alpha\nabla f(x_i)$。特点：每次沿梯度方向，易陷入“之字形”路径。

共轭梯度法

特点：优化方向共轭，避免最速下降法“之字形”，适用于二次型问题。

模拟退火法

特点：允许次优解，避免局部最优解，随温度降低收敛至全局解。

薛定谔方程数值解

离散化：$\left.\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}\right|_{x_i}\approx\frac{\psi_{i+1}-2\psi_i+\psi_{i-1}}{dx^2}$。

哈密顿矩阵：对角元：$H[i,i]=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{-2}{dx^2}+V(x_i)$。

非对角元：$H[i,i+1]=H[i,i-1]=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{dx^2}$。解：求解 $H\psi=E\psi$ 得 E,ψ。

2-矩阵的数值方法

高斯消元法 一次求解

核心思想：通过行变换将矩阵化为上三角形式，再进行回代求解。

1. **消元过程**：对第k列消元：$a_{ij}=a_{ij}-\frac{a_{ik}}{a_{kk}}a_{kj}$，$(i>k)$。
2. **回代过程**：从最后一行向上求解：$x_i=\frac{b_i-\sum_{j=i+1}^{n}a_{ij}x_j}{a_{ii}}$。
3. **时间复杂度**：$\mathcal{O}(n^3)$。

   缺陷：主元接近零时数值不稳定。

LU分解法 L,U可复用

核心思想：将矩阵分解为下三角矩阵$\mathbf{L}$与上三角矩阵$\mathbf{U}$，即$\mathbf{A}=\mathbf{LU}$。

1. **Crout算法**：计算$\mathbf{L}$和$\mathbf{U}$的元素
   - $l_{ik}=a_{ik}-\sum_{s=1}^{k-1}l_{is}u_{sk}$，$(i\geq k)$
   - $u_{kj}=\frac{a_{kj}-\sum_{s=1}^{k-1}l_{ks}u_{sj}}{l_{kk}}$，$(j\geq k)$。
2. **求解方程**：通过前代$\mathbf{Le}=\mathbf{C}$ 和回代$\mathbf{Ux}=\mathbf{e}$。
3. **时间复杂度**：$\mathcal{O}(n^3)$。

   区别：高斯消元直接将矩阵变为上三角，LU分解适合多次求解不同右端向量

三对角矩阵与Thomas算法 O(N)高效求解三对角矩阵

目标：求解三对角线性系统，形式为：

$$\begin{bmatrix} f_1 & g_1 & 0 & \dots & 0\\ e_2 & f_2 & g_2 & \dots & 0\\ 0 & e_3 & f_3 & g_3 & \dots\\ \dots & \dots & \dots & f_{n-1} & g_{n-1}\\ 0 & \dots & 0 & e_n & f_n \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1\\ x_2\\ \dots\\ x_n\end{bmatrix}=\begin{bmatrix} r_1\\ r_2\\ \dots\\ r_n\end{bmatrix}$$

1. 前代：$e'_k=e_k/f'_{k-1}$，$f'_k=f_k-e'_kg_{k-1}$。
2. 回代：$x_n=d_n/f'_n$，$x_k=(d_k-g_kx_{k+1})/f'_k$。

   时间复杂度：$\mathcal{O}(n)$。

矩阵特征值与对角化

特征值问题：$\mathbf{Ax}=\lambda\mathbf{x}$。从$|\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I}|=0$求解特征值$\lambda$。

对角化：若存在$\mathbf{P}$使$\mathbf{P}^{-1}\mathbf{AP}=\mathbf{\Lambda}$，则$\mathbf{A}$可对角化。条件：$\mathbf{A}$具有$n$个线性无关特征向量。

奇异值分解（SVD） 分解任意矩阵，应用于数据压缩与降维

分解形式：将任意矩阵$\mathbf{A}_{m\times n}$分解为$\mathbf{A}=\mathbf{U\Sigma V}^T$，其中$\mathbf{U}$和$\mathbf{V}$为正交矩阵，

性质：$\mathbf{\Sigma}$的奇异值是$\mathbf{A}^T\mathbf{A}$或$\mathbf{AA}^T$的非零特征值的平方根。 $\mathbf{\Sigma}$为奇异值对角矩阵。

应用：线性最小二乘、数据压缩、降维（如PCA）。

QR分解

分解形式：将矩阵$\mathbf{A}_{m\times n}$分解为$\mathbf{A}=\mathbf{QR}$，其中$\mathbf{Q}$为正交矩阵，$\mathbf{R}$为上三角矩阵。

用途：

1. 求解线性方程组：$\mathbf{QRx}=\mathbf{b}$。
2. QR迭代法：用于求解矩阵的特征值。

3-插值与拟合

插值方法概述

插值用于从离散数据中推断局部信息，建立插值函数$P(x)$，使其通过所有已知点(x_i,y_i)。

拉格朗日插值

插值公式：$P(x)=\sum_{j=0}^{n}y_j\prod_{i\neq j}\frac{x-x_i}{x_j-x_i}$。

优点：无需解线性方程组，适用于非等距节点。

缺点：增加节点时需重新计算所有系数，计算复杂度高。

牛顿插值 尽管理论上拟合多项式与拉格朗日一致（由Vandermonde行列式保证），注意节点顺序可能影响数值稳定性。

差商公式：$f[x_i,x_{i+1},\dots,x_j]=\frac{f[x_{i+1},\dots,x_j]-f[x_i,\dots,x_{j-1}]}{x_j-x_i}$。

插值多项式：$P(x)=f[x_0]+\sum_{k=1}^{n}f[x_0,x_1,\dots,x_k]\prod_{i=0}^{k-1}(x-x_i)$。

特点：新增节点时只需更新新的差商，避免拉格朗日插值的全局计算问题。

最小二乘拟合

目标：通过拟合函数$p(x)$使$\sum(y_i-p(x_i))^2$最小。

模型：$p(x)=\sum_{k=0}^{m}a_kx^k$。

目标函数：$\chi^2[a_k]=\sum_{i=0}^{n}[p(x_i)-y_i]^2$。

设计矩阵$\mathbf{A}=\begin{bmatrix}1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^m\\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^m\end{bmatrix}^T$。

正规方程：$(\mathbf{A}^T\mathbf{A})\mathbf{a}=\mathbf{A}^T\mathbf{y}$。通过SVD分解或伪逆矩阵处理奇异值问题，提高数值稳定性。

三次样条插值

分段三次多项式$S_i(x)$插值，满足条件：

1. $S_i(x_i)=y_i$，$S_i(x_{i+1})=y_{i+1}$（连通）。
2. $S'_i(x_{i+1})=S'_{i+1}(x_{i+1})$（一阶导数连续）。
3. $S''_i(x_{i+1})=S''_{i+1}(x_{i+1})$（二阶导数连续）。
4. 自然边界条件：$S''(x_0)=S''(x_n)=0$。

   利用三对角方程组求解，避免Runge现象。

Runge现象与节点优化

现象：等距节点插值时，多项式在区间两端振荡剧烈。

优化：

1. **Chebyshev节点**：$x_k=\cos\left(\frac{2k+1}{2n}\pi\right)$，$k=0,\dots,n-1$。
2. **Leja节点**：通过贪心算法选择，使新节点与已有节点距离最大化。

方法对比与总结

- **拉格朗日插值**：简单直接，但需全局重计算，适合少量数据。
- **牛顿插值**：新增节点高效，但节点顺序影响稳定性。
- **三次样条插值**：适合大规模数据，避免高次多项式振荡问题。
- **最小二乘拟合**：用于含噪声数据的趋势分析，模型可选线性或非线性。

  推荐：少量数据用牛顿插值，实际数据用样条插值，含噪声数据用最小二乘法。

4-数值微分与积分

泰勒展开与数值微分

基于泰勒展开：$f(x+h)=f(x)+hf'(x)+\frac{h^2}{2}f''(x)+O(h^3)$，可推导出一阶和二阶导数的差分公式：

前向差分：$f'(x)\approx\frac{f(x+h)-f(x)}{h}+O(h)$，误差为一阶。

后向差分：$f'(x)\approx\frac{f(x)-f(x-h)}{h}+O(h)$，误差为一阶。

中心差分：$f'(x)\approx\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}+O(h^2)$，误差为二阶，精度高于前/后向差分。

二阶导数差分公式

前向差分（二阶导数）：$f''(x)\approx\frac{f(x+2h)-2f(x+h)+f(x)}{h^2}+O(h)$。

后向差分（二阶导数）：$f''(x)\approx\frac{f(x)-2f(x-h)+f(x-2h)}{h^2}+O(h)$。

中心差分（二阶导数）：$f''(x)\approx\frac{f(x+h)+f(x-h)-2f(x)}{h^2}+O(h^2)$。

五点公式：

$$f''(x)\approx\frac{-f(x+2h)+16f(x+h)-30f(x)+16f(x-h)-f(x-2h)}{12h^2}+O(h^4)$$

五点公式具有四阶精度，适合高精度二阶导数计算。

Richardson外推法

用于提高数值微分或积分的精度。假设截断误差为 ch^k，则：

$$D(n,m)=D(n,m-1)+\frac{1}{4^m-1}[D(n,m-1)-D(n-1,m-1)]$$

通过逐步细分步长 h，消去误差项，提高公式精度至 $O(h^4)$ 或更高。算法通过构建 D 表格，每次将步长减半并更新数值。

总结

数值微分：前向和后向差分为一阶精度，中心差分为二阶精度，五点公式提供四阶精度。Richardson 外推法通过不同步长提高导数计算的精度。

数值积分：

- 梯形法：简单易实现，误差 $O(h^2)$。
- 辛普森法：更高精度 $O(h^4)$，适合平滑函数。
- Romberg法：结合梯形法与外推，提高精度，误差快速收敛。
- 高斯求积法：选择最优节点和权重，适合高精度积分。

  推荐：导数计算使用中心差分或五点公式，积分计算对高精度需求使用Romberg法或高斯求积法。

梯形法与辛普森法

梯形法：

$$\int_a^b f(x)dx\approx\frac{h}{2}\left[f(a)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)+f(b)\right]$$

其中 $h=\frac{b-a}{n}$，误差为 $O(h^2)$，适合线性函数。

辛普森法：

$$\int_a^b f(x)dx\approx\frac{\Delta x}{3}[f(a)+4f(a+\Delta x)+f(b)]$$

其中 $\Delta x=\frac{b-a}{2}$，要求节点数为偶数。误差为 $O(h^4)$，适用于三次多项式。

Romberg积分

将梯形法与 Richardson 外推结合，通过递推关系提高积分精度：

$$I_{j,k}\approx\frac{4^kI_{j,k-1}-I_{j-1,k-1}}{4^k-1}$$

- j：细分层级，k：外推层级。
- 初始值 $I_{0,0}$ 通过梯形法计算，随后通过细分区间 $h\to h/2$ 和外推提高精度。

  Romberg法能够快速收敛，误差随 k 的增加降低到更高阶。

高斯求积法

通过选择最佳积分点 x_i 和权重 w_i，对多项式积分精确到 $2n-1$ 次：

$$\int_{-1}^{1}f(x)dx\approx\sum_{i=1}^{n}w_if(x_i)$$

- 积分点为Legendre多项式的根，权重 w_i 可查表获得。
- **优势**：适用于平滑函数，非均匀分布节点提高积分精度。
- **示例**：两点、三点和四点高斯求积权重与节点位置由表格给出。

5-傅里叶变换

傅里叶级数

周期函数 $f(t)$，周期为 T，可表示为：

$$f(t)=\sum_{j=-\infty}^{\infty} g_j e^{-ij\omega t},\quad g_j=\frac{1}{T}\int_0^T f(t)e^{ij\omega t}dt,\quad \omega=\frac{2\pi}{T}$$

性质：线性性质 $af_1+bf_2\to ag_1+bg_2$，正交性 $\int_0^T e^{-ij\omega t}e^{ik\omega t}dt=T\delta_{jk}$。

连续傅里叶变换

非周期函数 $f(t)$ 的傅里叶变换：

$$F(\omega)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} f(t)e^{-i\omega t}dt,\quad f(t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} F(\omega)e^{i\omega t}d\omega$$

性质：导数性质 $F\{f'(t)\}=i\omega F(\omega)$，缩放性质 $F\{f(at)\}=\frac{1}{|a|}F\left(\frac{\omega}{a}\right)$。

离散傅里叶变换（DFT）

对于离散数据 f_n $(n=0,1,\ldots,N-1)$，DFT 为：

$$f_k=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{n=0}^{N-1} f_n e^{i2\pi kn/N},\quad k=0,1,\ldots,N-1$$

性质：周期性 $f(n+N)=f(n)$，正交性 $\sum_{n=0}^{N-1} e^{-i2\pi kn/N}e^{i2\pi ln/N}=N\delta_{kl}$。

快速傅里叶变换（FFT）

FFT 优化 DFT，复杂度由 $O(N^2)$ 降低至 $O(N\log N)$。

思想：分解 N 点 DFT 为两个 $N/2$ 点 DFT，分别计算奇偶项，最终合并结果。

蝴蝶算法：每层计算将数据点 x_n 重新排序（二进制反转），奇偶项通过 $e^{-i2\pi k/N}$ 合并：

$$X_k=E_k+W_kO_k,\quad W_k=e^{-i2\pi k/N},\ k=0,1,\ldots,N/2-1$$

- E_k 和 O_k：偶数项与奇数项的结果，W_k：旋转因子，利用对称性减少计算量。

应用

信号主频提取与谱分析，计算势能傅里叶系数求解能级。

总结

傅里叶级数用于周期函数，DFT 适用于离散数据，FFT 大幅提高计算效率。

蝴蝶算法利用二进制反转和旋转因子加速计算，是 FFT 的核心。

6-常微分方程数值解法

二阶微分方程

将二阶方程 $y''(x)=f(x,y,y')$ 转化为一阶方程组：

$$y_1=y,\ y_2=y',\quad y_1'=y_2,\ y_2'=f(x,y_1,y_2)$$

适用于欧拉法、RK 方法等数值解法。

初值问题数值解法流程

对于初值问题：

$$\frac{dy}{dx}=f(x,y),\ y(x_0)=y_0$$

1. 设定步长 h 和积分区间 $[x_0,x_N]$。
2. 迭代计算 y_{i+1} 的数值解。
3. 选择不同方法（如欧拉法也即RK1、RK 高阶方法）更新

欧拉法（Euler's Method）

$$y_{i+1}=y_i+hf(x_i,y_i)$$

局部误差 $O(h^2)$，全局误差 $O(h)$。

RK2 方法

增量函数 $\Phi=a_1k_1+a_2k_2$，$k_1=f(x_i,y_i),k_2=f(x_i+p_1h,y_i+q_{11}k_1h)$。

1. 中点法：$a_1=0,a_2=1,p_1=\frac{1}{2},q_{11}=\frac{1}{2}$，

$$k_1=f(x_i,y_i),\ k_2=f\left(x_i+\frac{h}{2},y_i+\frac{h}{2}k_1\right),\ y_{i+1}=y_i+hk_2$$

2. 改进欧拉法（Heun's Method）：$a_1=a_2=\frac{1}{2},p_1=1,q_{11}=1$，

$$k_1=f(x_i,y_i),\ k_2=f(x_i+h,y_i+hk_1),\ y_{i+1}=y_i+\frac{h}{2}(k_1+k_2)$$

局部误差 $O(h^3)$，全局误差 $O(h^2)$。

RK3 方法

$$k_1=f(x_i,y_i),\quad k_2=f\left(x_i+\frac{h}{2},y_i+\frac{h}{2}k_1\right),\quad k_3=f(x_i+h,y_i-hk_1+2hk_2)$$

$$y_{i+1}=y_i+\frac{h}{6}(k_1+4k_2+k_3)$$

局部误差 $O(h^4)$，全局误差 $O(h^3)$。

RK4 方法

$$k_1=f(x_i,y_i),\quad k_2=f\left(x_i+\frac{h}{2},y_i+\frac{h}{2}k_1\right),$$

$$k_3=f\left(x_i+\frac{h}{2},y_i+\frac{h}{2}k_2\right),\quad k_4=f(x_i+h,y_i+hk_3)$$

$$y_{i+1}=y_i+\frac{h}{6}(k_1+2k_2+2k_3+k_4)$$

局部误差 $O(h^5)$，全局误差 $O(h^4)$。

分子动力学算法

Euler-Cromer 法

$$v_{i+1}=v_i+a_ih,\quad r_{i+1}=r_i+v_{i+1}h$$

局部误差 $O(h^2)$，适合保辛系统，能量守恒。

Verlet 算法

$$r(t+h)=2r(t)-r(t-h)+a(t)h^2,\quad v(t)=\frac{r(t+h)-r(t-h)}{2h}$$

时间反演对称，适用于牛顿方程。

Velocity-Verlet 算法

$$r(t+h)=r(t)+hv(t)+\frac{h^2}{2}a(t),\quad v(t+h)=v(t)+\frac{h}{2}[a(t)+a(t+h)]$$

结合 Verlet 精度与速度更新优势，广泛用于分子动力学模拟。

射击法（Shooting Method）

适用于二阶边值问题：

$$y''(x)=-\lambda y(x),\quad y(0)=0,\ y(1)=0$$

流程：1. 设初始斜率 $y'(0)=a$（归一化不影响解）。2. 选取初始特征值 λ，从 $x=0$ 积分至 $x=1$。3. 调整 λ，使得 $y(1)=0$。

有限差分法（FDM）

离散二阶边值问题 $u''(x)=f(x),u(0)=u_a,u(1)=u_b$：

$$\frac{u_{i+1}-2u_i+u_{i-1}}{h^2}=f_i,\quad i=1,\ldots,N-1$$

稀疏矩阵形式：

$$\begin{bmatrix}2&-1&0&\cdots&0\\-1&2&-1&\cdots&0\\0&-1&2&\cdots&0\\\vdots&\vdots&\vdots&\ddots&-1\\0&0&0&-1&2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}u_1\\u_2\\u_3\\\vdots\\u_{N-1}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}h^2f_1+u_a\\h^2f_2\\h^2f_3\\\vdots\\h^2f_{N-1}+u_b\end{bmatrix}$$

通过高斯消元或迭代法求解。

总结

RK2 包含中点法与改进欧拉法，RK3 精度较高，RK4 精度高且稳定，适合初值问题。Euler-Cromer 与 Verlet 系列适用于分子动力学。射击法通过调节特征值求解边值问题。FDM 离散导数构建稀疏矩阵，适合数值稳定求解边值问题。

7-偏微分方程数值解法

偏微分方程分类

$$A\frac{\partial^2u}{\partial x^2}+B\frac{\partial^2u}{\partial x\partial y}+C\frac{\partial^2u}{\partial y^2}+F=0$$

类型	判别式条件	典型方程
椭圆型	$B^2-4AC<0$	拉普拉斯方程 $\nabla^2u=0$
抛物型	$B^2-4AC=0$	热传导方程 $\partial_tu=\nabla^2u$
双曲型	$B^2-4AC>0$	波动方程 $\partial_t^2u=c^2\nabla^2u$

椭圆型方程：有限差分法与迭代方法

五点差分格式：

$$u_{i,j}=\frac{1}{4}(u_{i+1,j}+u_{i-1,j}+u_{i,j+1}+u_{i,j-1})$$

Jacobi 方法：

$$u_{i,j}^{n+1}=\frac{1}{4}(u_{i+1,j}^n+u_{i-1,j}^n+u_{i,j+1}^n+u_{i,j-1}^n)$$

只依赖前一步数据，适合并行计算，但收敛较慢。谱半径为 $\rho_{\text{Jacobi}}=\cos\frac{\pi}{N_x}+\cos\frac{\pi}{N_y}$

Gauss-Seidel 方法：

$$u_{i,j}=\frac{1}{4}(u_{i+1,j}+u_{i-1,j}+u_{i,j+1}+u_{i,j-1})$$

隐式更新，收敛较快，但难以并行实现。

SOR 方法：

$$u_{i,j}=(1-\omega)u_{i,j}+\omega\frac{1}{4}(u_{i+1,j}+u_{i-1,j}+u_{i,j+1}+u_{i,j-1})$$

松弛因子为 $\omega=\frac{2}{1+\sqrt{1-\rho_{\text{Jacobi}}^2}}$。在合适的 ω 下，收敛速度最快。

双曲型方程：波动方程与稳定性

波动方程：

$$\frac{\partial^2u}{\partial t^2}=c^2\frac{\partial^2u}{\partial x^2}$$

离散化公式：

$$u_i^{n+1}=2u_i^n-u_i^{n-1}+\lambda^2(u_{i+1}^n-2u_i^n+u_{i-1}^n),\quad \lambda=\frac{c\Delta t}{\Delta x}$$

稳定性条件（Von Neumann 分析）：$\lambda\le 1$。 CFL

抛物型方程：时间步进法

热传导方程：

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\alpha\frac{\partial^2u}{\partial x^2}$$

显式格式：

$$u_j^{n+1}=u_j^n+\lambda(u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n),\quad \lambda=\frac{\alpha\Delta t}{\Delta x^2}$$

稳定性条件：$\lambda\le\frac{1}{2}$ (Von Neumann 分析)。

隐式格式：

$$-\lambda u_{j-1}^{n+1}+(1+2\lambda)u_j^{n+1}-\lambda u_{j+1}^{n+1}=u_j^n$$

无条件稳定，但需解线性方程组。

Crank-Nicolson 格式：

$$u_j^{n+1}-\frac{\lambda}{2}(u_{j+1}^{n+1}-2u_j^{n+1}+u_{j-1}^{n+1})=u_j^n+\frac{\lambda}{2}(u_{j+1}^n-2u_j^n+u_{j-1}^n)$$

隐显结合，二阶精度，无条件稳定。

含时薛定谔方程：Crank-Nicolson 与显式稳定方法

含时薛定谔方程：

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{1}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+V(x)\psi$$

Crank-Nicolson 方法：

$$\left(I+i\frac{\Delta t}{2}H\right)\psi^{n+1}=\left(I-i\frac{\Delta t}{2}H\right)\psi^n$$

构造三对角矩阵，隐式更新，二阶精度，无条件稳定。

显式稳定格式：

$$\psi_j^{n+1}=\psi_j^{n-1}+i\frac{\Delta t}{\Delta x^2}(\psi_{j+1}^n-2\psi_j^n+\psi_{j-1}^n)-2i\Delta tV_j\psi_j^n$$

第一时间步使用 Crank-Nicolson 保证稳定性，后续显式更新，效率高但时间步长受限

稳定性分析：Von Neumann 方法

设离散解为傅里叶模式 $u_j^n=\xi^ne^{ikj\Delta x}$。代入离散方程，得放大因子 ξ。

8-蒙特卡洛方法与随机抽样

随机变量生成方法

- **逆变换法**：将均匀分布随机数 $R\sim U[0,1]$ 转换为目标分布 X：
  1. 计算累积分布函数 $F(x)$。
  2. 解方程 $F(x)=R$ 得 $x=F^{-1}(R)$。
  3. 随机数 R 对应的目标变量为 $X_i=F^{-1}(R_i)$。
- **接受-拒绝法**：
  1. 从提议分布 $g(x)$ 生成样本 X^*，$U\sim U[0,1]$。
  2. 如果 $U\le\frac{f(X^*)}{M\cdot g(X^*)}$，接受 X^*，否则重试。
  3. M 需满足 $Mg(x)\ge f(x)$。
- **直接变换法**：适用于特定分布，通过解析变换直接生成随机样本。

蒙特卡洛积分方法

基本思路：通过随机抽样估计积分 $I=\int_a^b f(x)dx$。

Hit and Miss 方法：

1. 在 $[a,b]\times[0,Y_{\max}]$ 区域生成随机点 (X_i,Y_i)。
2. 统计 $Y_j<f(X_i)$ 的点数 s，估算积分：

$$I=Y_{\max}(b-a)\frac{s}{N}$$

Metropolis 算法

Metropolis 算法通过随机抽样实现平衡分布 $P(C)\propto e^{-\beta E(C}$

基本步骤：

1. 随机选取初始状态 R_0。
2. 尝试新状态 $R_1=R_0+\Delta R$，其中 $\Delta R\sim[-h,h]$。
3. 计算接受概率：
   $p=\frac{\mathcal{W}(R_1)}{\mathcal{W}(R_0)}=e^{-\beta\Delta E},\quad \Delta E=E(R_1)-E(R_0)$
4. 生成随机数 $w\sim U[0,1]$，若 $p\ge w$，接受新状态 R_1，否则保留R_0
5. 重复步骤 2-4，直至系统达到平衡态。

细致平衡条件：

$W(C\to C')P(C)=W(C'\to C)P(C')$

Metropolis 算法通过满足细致平衡确保系统收敛至平衡分布。

Ising 模型与自旋系统模拟

Ising 模型的哈密顿量为：

$H=-J\sum_{\langle i,j\rangle}s_is_j$

其中 $s_i=\pm1$，表示自旋方向，$\langle i,j\rangle$ 表示最近邻格点对，J 为耦合常数。

模拟步骤：

1. 随机选取自旋 s_i，尝试翻转。
2. 计算能量变化 ΔE。
3. 根据 Metropolis 算法接受或拒绝翻转。
4. 重复步骤 1-3，统计系统的平均磁化强度和能量。

Swendsen-Wang 算法：

1. 根据概率 $p=1-e^{-2\beta J}$ 添加边，形成簇。
2. 翻转每个簇的所有自旋。 一般按照 $\frac{1}{2}$ 概率

Wolff 算法：

1. 随机选择一个格点作为种子，依据 $p=1-e^{-2\beta J}$ 添加边，生长单个簇
2. 翻转整个簇，自旋更新更高效。

附录-Fortran 语言基础考点

程序结构与基础语法

Fortran 程序结构：

`PROGRAM 程序名 → [声明语句] → [执行语句] → END PROGRAM`

关键点：

- **注释**：`!` 开头。
- **变量命名**：字母开头，最多 31 个字符，大小写不敏感。
- **类型声明**：`INTEGER`、`REAL`、`COMPLEX`、`LOGICAL`、`CHARACTER`。
  - 常量声明：`PARAMETER` 关键字，如 `REAL, PARAMETER :: PI = 3.14159`

```
IF (逻辑表达式) THEN ... ELSE ... END IF
SELECT CASE (变量) CASE (条件) ... CASE DEFAULT ... END SELECT
```

确定性循环：`DO i = 初值, 终值, 步长`

非确定性循环：`DO ... IF(条件) EXIT ... END DO`

重要考点与易错点

跳过当前迭代：`CYCLE`

1. **隐含规则**：`I-N` 开头变量默认整型，其他实型，使用 `IMPLICIT NONE`
2. **整数除法**：整型相除取整，需显式转换为实型：`REAL(3)/2`。
3. **数据类型转换**：`REAL()` 将整数转实数，`INT()` 将实数转整数。
4. **DO 循环**：步长为 0 会导致错误，步长默认 1。
5. **模块化编程**：用 `MODULE` 共享数据与子程序，`USE` 语句调用模块。
6. **逻辑运算**：`TRUE` 和 `FALSE` 逻辑型常量，常用在 `IF` 判断中。