

第十六次课—总结与复习

田付阳

应用物理研究所
数理学院物理系
北京科技大学

June 11, 2018



概括

- 1 计算物理学(第一次课)
- 2 函数的近似方法(第二-三次课)
- 3 非齐次方程的数值解法(第四-五次课)
- 4 常微分方程的数值解法(第六-七-八次课)
- 5 偏微分方程的数值解法(第九-十次课)
- 6 快速傅立叶变换(第十一次课)
- 7 蒙特卡罗模拟(第十二次课)
- 8 晶格反演-层状模型(第十三次课)
- 9 有限元素方法及Random物理模型(第十四次课)

- 1 计算物理学(第一次课)
- 2 函数的近似方法(第二-三次课)
- 3 非齐次方程的数值解法(第四-五次课)
- 4 常微分方程的数值解法(第六-七-八次课)
- 5 偏微分方程的数值解法(第九-十次课)
- 6 快速傅立叶变换(第十一次课)
- 7 蒙特卡罗模拟(第十二次课)
- 8 晶格反演-层状模型(第十三次课)
- 9 有限元素方法及Random物理模型(第十四次课)

什么是计算物理学

计算物理学是以计算机及计算机技术为工具和手段，运用计算数学的方法，解决复杂物理问题的一门应用科学。

也称为数值物理；一些数值计算必须借助计算机才能实现，也称为应用计算机的物理。

- 渗透到物理科学与工程学的各个方面，成为一个新兴的交叉科学；
- 物理学、计算数学、计算机科学三者有机结合的学科；
- 作为物理学的一个分支，与理论物理、实验物理关系极为密切，但有保持其相对独立性。

计算过程中，误差主要是由四舍五入及截断引起的，特别迭代过程中，迭代步数、精度要求，计算机性能等应综合考虑。

是一门应用性极强的学科，编程是途径。

- 1 计算物理学(第一次课)
- 2 函数的近似方法(第二-三次课)
- 3 非齐次方程的数值解法(第四-五次课)
- 4 常微分方程的数值解法(第六-七-八次课)
- 5 偏微分方程的数值解法(第九-十次课)
- 6 快速傅立叶变换(第十一次课)
- 7 蒙特卡罗模拟(第十二次课)
- 8 晶格反演-层状模型(第十三次课)
- 9 有限元素方法及Random物理模型(第十四次课)

- Lagrange插值;
- 多项式插值-三次样条插值;
- 基于最小二乘法的线性拟合;
- 基于最小二乘法的多项式拟合.

如何利用matlab的函数库实现插值和多项式函数拟合?

- 1 计算物理学(第一次课)
- 2 函数的近似方法(第二-三次课)
- 3 非齐次方程的数值解法(第四-五次课)
- 4 常微分方程的数值解法(第六-七-八次课)
- 5 偏微分方程的数值解法(第九-十次课)
- 6 快速傅立叶变换(第十一次课)
- 7 蒙特卡罗模拟(第十二次课)
- 8 晶格反演-层状模型(第十三次课)
- 9 有限元素方法及Random物理模型(第十四次课)

非齐次方程的数值解法

线性代数方程组的数值解法

- ① 高斯消元法
- ② LU分解法
- ③ 三对角矩阵追赶法
- ④ 迭代方法

非线性方程的数值解法

- ① 二分法
- ② 弦截法
- ③ 迭代法

非线性方程组的数值解法：牛顿迭代法和最速下降法
矛盾方程组的数值解法：最小二乘法

- 1 计算物理学(第一次课)
- 2 函数的近似方法(第二-三次课)
- 3 非齐次方程的数值解法(第四-五次课)
- 4 常微分方程的数值解法(第六-七-八次课)
- 5 偏微分方程的数值解法(第九-十次课)
- 6 快速傅立叶变换(第十一次课)
- 7 蒙特卡罗模拟(第十二次课)
- 8 晶格反演-层状模型(第十三次课)
- 9 有限元素方法及Random物理模型(第十四次课)

常微分方程的数值解法

常微分方程(组)的初值问题的数值解法

- ① Euler折线方法-改进折线方法
- ② Runge-Kutta方法
- ③ 初值问题的差分方法
- ④ 刚性微分方程

边值问题的数值解法

- ① 差分法
- ② 打靶法

软件实现: matlab ode45

物理实例: 定态薛定谔方程的求解方法

- 1 计算物理学(第一次课)
- 2 函数的近似方法(第二-三次课)
- 3 非齐次方程的数值解法(第四-五次课)
- 4 常微分方程的数值解法(第六-七-八次课)
- 5 偏微分方程的数值解法(第九-十次课)
- 6 快速傅立叶变换(第十一次课)
- 7 蒙特卡罗模拟(第十二次课)
- 8 晶格反演-层状模型(第十三次课)
- 9 有限元素方法及Random物理模型(第十四次课)

偏微分方程的数值解

差分格式类型及其稳定性:

- ① 对流方程: 迎风格式、蛙跳格式、FTCS格式、Lax格式、双层加权平均格式等
- ② 双曲型方程: 弦振动方程
- ③ 抛物型方程: 线上法, FTCS格式及Crank-Nicolson差分方法/二维抛物型方程
- ④ 椭圆型方程: 泊松方程、Helmholtz方程、Laplace方程/迭代方法特点/热传导例子

非线性的数值求解

- ① KdV方程及孤立子的数值模拟
- ② 浅水波方程
- ③ 粘滞不可压缩流体

重点看明白热传导及Helmholtz方程对应的实例。

- 1 计算物理学(第一次课)
- 2 函数的近似方法(第二-三次课)
- 3 非齐次方程的数值解法(第四-五次课)
- 4 常微分方程的数值解法(第六-七-八次课)
- 5 偏微分方程的数值解法(第九-十次课)
- 6 快速傅立叶变换(第十一次课)**
- 7 蒙特卡罗模拟(第十二次课)
- 8 晶格反演-层状模型(第十三次课)
- 9 有限元素方法及Random物理模型(第十四次课)

- ① 基本知识点
- ② 离散傅立叶变换
- ③ 快速傅立叶变换

- 1 计算物理学(第一次课)
- 2 函数的近似方法(第二-三次课)
- 3 非齐次方程的数值解法(第四-五次课)
- 4 常微分方程的数值解法(第六-七-八次课)
- 5 偏微分方程的数值解法(第九-十次课)
- 6 快速傅立叶变换(第十一次课)
- 7 蒙特卡罗模拟(第十二次课)
- 8 晶格反演-层状模型(第十三次课)
- 9 有限元素方法及Random物理模型(第十四次课)

Monte Carlo simulation

- ① 基本知识点
- ② 随机数和随机抽样
- ③ 应用，相关程序的实现

- 1 计算物理学(第一次课)
- 2 函数的近似方法(第二-三次课)
- 3 非齐次方程的数值解法(第四-五次课)
- 4 常微分方程的数值解法(第六-七-八次课)
- 5 偏微分方程的数值解法(第九-十次课)
- 6 快速傅立叶变换(第十一次课)
- 7 蒙特卡罗模拟(第十二次课)
- 8 晶格反演-层状模型(第十三次课)
- 9 有限元素方法及Random物理模型(第十四次课)

- 1 计算物理学(第一次课)
- 2 函数的近似方法(第二-三次课)
- 3 非齐次方程的数值解法(第四-五次课)
- 4 常微分方程的数值解法(第六-七-八次课)
- 5 偏微分方程的数值解法(第九-十次课)
- 6 快速傅立叶变换(第十一次课)
- 7 蒙特卡罗模拟(第十二次课)
- 8 晶格反演-层状模型(第十三次课)
- 9 有限元素方法及Random物理模型(第十四次课)

- ① 变分原理
- ② 基于变分或加权余量法的有限元素方法
- ③ 遗传算法及神经网络

- 计算物理-基于计算机的近似物理

- 计算物理-基于计算机的近似物理
- 多项式展开；泰勒展开；

- 计算物理-基于计算机的近似物理
- 多项式展开；泰勒展开；
- 物理专题.

感谢关注!