

MATH2103: Lecture Note on Numerical Solution of Partial Differential Equations

Shixiao W. Jiang

Institute of Mathematical Sciences, ShanghaiTech University, Shanghai 201210, China

`jiangshx@shanghaitech.edu.cn`

2025 年 9 月 19 日

Contents

1	Review of Partial Differential Equations	2
1.1	计算数学的发展历史	2
1.2	计算数学领域在中国的发展	4
1.3	中国计算数学在国际上强不强为什么工业软件开发上感觉异常困难	6
1.4	神经网络在求解PDE中的价值、前景与可靠性评价	8
1.5	我应不应该学计算数学或我应不应该选修偏微分方程数值解	10
1.6	What are Partial Differential Equations	12
1.7	Linear and Nonlinear PDEs	12
1.8	Three Classes of Linear Second-Order Equations	13
1.9	Boundary Conditions and Initial Conditions	14
1.10	Conservation Laws, Constitutive Relations, Dimensionless Analysis (Convection-Diffusion Equation)	15
1.10.1	Conservation Laws	15
1.10.2	Constitutive Relations	15
1.10.3	Boundary Conditions	16
1.10.4	Dimensionless Analysis	16
1.11	Mass Conservation and Continuity Equation	17
1.12	Variational Principle and Equivalence of Three Types of Formulation for Elliptic Problems	17
1.13	Normed Vector Spaces	18
1.14	Numerical Methods	19

Chapter 1

Review of Partial Differential Equations

1.1 计算数学的发展历史

好的，计算数学作为一门交叉学科，其发展历史与计算工具的演进紧密相连，大致可以分为四个主要阶段。它的核心目标是开发、分析和应用数学模型与算法，通过计算机解决科学和工程中的复杂问题。

以下是计算数学的发展简史：

第一阶段：前计算机时代（~1940s以前）——思想萌芽与理论基础 在这个阶段，许多核心的数学思想已经诞生，但受限于计算工具（人力或机械计算机），发展主要集中在理论层面。

- **古代：**早期的数值计算思想，如巴比伦的平方根算法、中国的“方程术”和“割圆术”（刘徽、祖冲之用多边形逼近圆周率 π ）。
- **17世纪：**微积分的诞生（牛顿、莱布尼茨）为计算数学提供了最根本的数学模型——微分方程。
- **18-19世纪：**
 - **数值方法的基础：**许多伟大的数学家为数值计算奠定了基石。
 - * **欧拉(Leonhard Euler)：**提出了欧拉法（求解常微分方程的最基本方法）。
 - * **高斯(Carl Friedrich Gauss)：**提出了高斯消元法（求解线性方程组）、最小二乘法以及高斯求积公式（数值积分）。
 - * **拉格朗日(Joseph-Louis Lagrange)：**多项式插值理论。
 - * **傅里叶(Joseph Fourier)：**傅里叶级数，为后来的谱方法奠定了基础。
 - **有限差分法：**思想开始出现，用差商代替微商。

第二阶段：现代计算数学的诞生（1940s-1950s）——与电子计算机共同崛起

电子计算机的发明是计算数学作为一门独立学科诞生的最直接催化剂。人们突然拥有了执行海量计算的能力，但如何高效、准确地利用这种能力成为了新问题。

- **核心驱动力：**二战期间的军事需求，如曼哈顿计划（核武器设计）、弹道计算、密码破解等。

- 标志性人物与事件：

- 冯·诺依曼(John von Neumann) & 乌拉姆(Stanislaw Ulam)：在发展计算机架构的同时，系统地分析了算法的数值稳定性和舍入误差问题。他们意识到，一个数学上正确的方法在计算机上可能会因为舍入误差而完全失效。
- 数值线性代数的成熟：阿林·图灵(Alan Turing) 分析了高斯消元法的稳定性。詹姆斯·威尔金森(James H. Wilkinson) 在后来的工作中系统发展了后向误差分析理论，成为数值分析的理论基石。
- 蒙特卡洛方法(Monte Carlo Method)：由冯·诺依曼、乌拉姆和梅特罗波利斯 (Nicholas Metropolis) 等人提出，利用随机抽样解决确定性难题。
- 有限元法(FEM) 的思想萌芽：库兰特(Richard Courant) 在1943年首次提出了类似有限元的思想。

第三阶段：快速发展与成熟（1960s-1980s）——算法大爆发

计算机性能的不断提升和应用需求的扩大，催生了大量强大而实用的数值算法。

- 算法开发的“黄金时代”：

- 科莱(Gene Golub)：系统发展了矩阵分解（如SVD奇异值分解）的数值方法。
 - 快速算法：库利(James Cooley) 和图基(John Tukey) 重新发现并普及了快速傅里叶变换(FFT)，极大地加速了信号处理和频谱分析。
 - 求解线性方程组的迭代法：共轭梯度法等迭代法得到发展和完善。
 - 常微分方程(ODE) 和偏微分方程(PDE) 求解器：龙格-库塔法、多步法（如Adams、BDF方法）变得成熟，并出现了成熟的软件包（如ODEPACK）。
- 有限元法的正式创立与普及：在特纳(Ray W. Clough)、辛凯维奇(Olgierd Zienkiewicz) 和阿吉里斯(John Argyris) 等工程师和数学家的推动下，FEM理论体系得以完善，并成为工程领域（结构分析、流体力学等）最强大的数值模拟工具。
 - 软件库的形成：出现了如LINPACK、EISPACK（线性代数和特征值计算）和NAG等著名的数值算法库，标志着计算数学的成果开始被系统化地封装和共享。

第四阶段：现代与未来（1990s至今）——大规模计算与数据科学

这一阶段的特征是问题规模急剧增大、计算环境高度复杂（并行、分布式），并且与数据科学深度融合。

- 高性能计算(HPC)：算法设计必须考虑大规模并行计算（MPI, OpenMP）、GPU加速。针对百万甚至十亿级未知数的超大规模问题，新的并行算法和预条件子成为研究重点。
- 稀疏矩阵技术：成为处理PDE离散后产生的大规模线性系统的核心技术。
- 科学与工程计算：计算数学成为继“理论”和“实验”之后的第三大科学研究范式，广泛应用于气候模拟、天体物理、新材料设计、生物医学等领域。
- 与数据科学的融合：

- **机器学习的基础**：许多机器学习核心算法本质上是计算数学问题（如优化算法（梯度下降、牛顿法）、线性代数（SVD, PCA）、随机算法）。
- **不确定性量化(UQ)**：研究如何量化数学模型中的不确定性和误差，为基于模拟的决策提供可靠依据。
- **反问题**：从观测数据中推断模型参数（如医学CT成像、地质勘探）变得日益重要。

- **新范式：**

- **随机数值算法**：针对超大矩阵，发展出了基于随机采样的高效近似算法。
- **张量计算**：发展处理高维数据（张量）的算法。
- **量子计算算法**：探索为未来量子计算机设计的数值线性代数等算法。

总结

计算数学的发展史是一部从数学思想萌芽到与计算机技术深度绑定，再到解决日益复杂的科学工程问题并赋能数据科学的历史。其核心追求始终未变：**为复杂的数学问题寻找在计算机上可执行、高效且可靠（稳定、准确）的算法。**

1.2 计算数学领域在中国的发展

好的，中国在计算数学领域的发展是一部从艰难起步到迎头赶上，并在部分方向达到世界领先水平的奋斗史。其发展轨迹与国家命运紧密相连，大致可分为以下几个阶段：

第一阶段：奠基与开拓（1950年代-1960年代中期）

新中国成立后，面对国家建设和国防安全的迫切需求，计算数学作为一门关键支撑学科被高度重视。

- **标志性事件**：1956年，在周恩来总理主持制定的《十二年科学技术发展规划》中，计算技术的建立被列为四大紧急措施之一（另三项是半导体、自动化、电子学）。这为计算数学在中国的发展提供了最高层面的政策保障。
- **关键人物与机构**：
 - **华罗庚**：中国计算数学的主要奠基人和开拓者。他亲自在中国科学院数学研究所组建了中国第一个计算数学研究组，并带领一批年轻人开展研究。
 - **冯康**：另一位奠基人，当时在华罗庚的课题组内，后来成为独立学派的开创者（见下文）。
 - **北京大学、吉林大学**：最早设立计算数学专业的高校，为中国培养了第一批计算数学人才。
- **早期工作**：主要围绕**大型水坝建设**（如刘家峡）中的应力计算、**国防事业**（如核武器研制、航天器轨道计算）中的微分方程数值解等国家任务展开。研究重点包括**数值代数**、**微分方程数值解**和**计算程序设计**。

第二阶段：独立自主的重大成就——“冯康学派”与有限元法（1960年代中期-1980年代）

尽管受到“文革”的冲击，中国计算数学仍在艰难环境中取得了举世瞩目的里程碑式成就。

- **冯康与有限元法**：这是中国对世界计算数学最杰出的贡献。

- **独立发展：**在1960年代中期，冯康及其领导的研究团队（包括黄鸿慈、崔俊芝等）独立于西方（如美国的Clough）发展了**基于变分原理的有限元法（FEM）**。冯康从数学物理问题的变分原理出发，奠定了有限元法的严密数学基础。
- **国际认可：**这一成果因其理论上的严谨性和通用性获得了极高的国际声誉，形成了国际计算数学界公认的“冯康学派”。
- **其他重要贡献：**
 - **石钟慈：**在有限元方法的收敛性研究方面做出了奠基性的工作，证明了西方学者提出的“检验猜测”，系统研究了多种非协调元的收敛性，形成了系统的理论。
 - **周毓麟：**在非线性偏微分方程及其数值求解方面（特别是在核武器理论研究中的数值模拟）做出了卓越贡献。
- **恢复与发展：**“文革”结束后，计算数学研究迅速恢复。1980年，冯康创建了中国科学院计算中心，并担任主任，使之成为中国计算数学的重要研究基地。

第三阶段：开放融合与全面发展（1990年代-2010年代）

随着改革开放的深入，中国计算数学家与国际同行的交流日益频繁，研究方向全面拓宽，水平迅速提升。

- **人才队伍：**一批在海外深造、工作的优秀华人计算数学家（如鄂维南、舒其望、许进超、包刚、金石、沈捷等）与国内联系紧密，他们将国际最前沿的课题和方法带回国内，极大地推动了中国计算数学的现代化和国际化。
- **研究领域拓宽：**研究不再局限于传统的微分方程数值解和数值代数，迅速扩展到：
 - **科学计算：**多物理场模拟、计算流体力学（CFD）、计算材料学等。
 - **应用与计算调和分析：**小波分析、稀疏表示等。
 - **不确定性量化（UQ）和反问题。**
 - **计算几何与等几何分析。**
- **学术共同体形成：**中国计算数学学会活跃，定期举办全国会议。期刊《Journal of Computational Mathematics》和《计算数学》中文版成为重要学术阵地。

第四阶段：迈向世界领先与面向未来（2010年代至今）

当前，中国计算数学已整体进入国际第一方阵，并在若干方向引领发展，同时积极应对新的科学挑战。

- **领军人物与荣誉：**
 - **鄂维南：**因在应用数学和计算数学领域的多项开创性贡献（从多尺度模型到机器学习），他现在主要推动**AI for Science**（科学智能）这一新范式。
 - **其他顶尖学者：**如张平文（多尺度计算）、江松（计算流体力学）、陈志明（自适应有限元方法）等院士，他们在各自领域均是世界级的领导者。
- **与前沿科技的深度融合：**

- **AI for Science:** 中国学者（特别是鄂维南及其团队）在此领域处于全球引领地位，致力于将机器学习与科学计算结合，解决物理、化学、生物等领域的复杂问题。
 - **支持大国工程:** 计算数学在航空航天（C919大飞机、航天器）、深海探测、气候变化预测、新药研发等国家重大科技项目中发挥着不可替代的作用。
- **挑战与未来:**
 - 虽然在理论和方法的某些点上已达到顶尖，但在大型工业软件内核算法（如CAE、EDA）、顶尖开源计算库的开发和生态建设上，与美国仍有差距。
 - 未来发展方向包括：量子计算算法、数据科学中的计算问题、超大规模复杂系统的模拟等。

总结

中国计算数学的发展之路是：

1. 因国家需求而诞生（1950s）。
 2. 在特殊时期凭智慧和毅力取得独立突破（冯康的有限元法）。
 3. 通过改革开放融入国际学界并全面发展。
 4. 至今已在部分基础研究和前沿交叉领域达到世界领先水平（如鄂维南的菲尔兹奖和AI for Science），并全力服务于国家的科技创新战略。
- 它从一个侧面反映了中国现代科技从无到有、从弱到强的奋斗历程。

1.3 中国计算数学在国际上强不强为什么工业软件开发上感觉异常困难

这是一个非常犀利且切中要害的问题。它触及了中国科技发展的一个核心矛盾：强大的基础科研能力与相对滞后的高端工业软件产业之间的巨大落差。

我们可以分两部分来解答：

第一部分：中国计算数学在国际上强不强？

结论：非常强，已稳居世界第一梯队。

1. **顶尖的学者和成果：**以冯康（独立发展有限元法）、鄂维南（推动AI for Science）、石钟慈（有限元理论）、周毓麟（偏微分方程数值解）等为代表的中国数学家做出了载入史册的贡献。中生代和新生代如张平文、江松、陈志明、包刚等院士和学者也在国际学术界担任着领导角色。
2. **完整的人才梯队：**中国拥有从清华、北大、中科院、复旦、浙大等顶尖高校到众多重点院校的完整计算数学人才培养体系，每年产出大量高质量博士和科研成果。
3. **活跃的研究前沿：**在当前最热门的**AI for Science**（科学智能）、**不确定性量化**、**多尺度建模与计算**等领域，中国团队（尤其是鄂维南院士领导的北京科学智能研究院等机构）处于全球引领者的位置。
4. **国际认可度：**中国计算数学家频繁受邀在国际顶级会议上做大会报告，担任顶级期刊主编、编委，并获得各种国际奖项，这是国际同行对其水平的直接认可。

所以，从纯学术研究和理论创新角度看，中国计算数学的实力是毋庸置疑的。

第二部分：为什么工业软件开发上感觉异常困难？

这正是问题的关键所在。工业软件（尤其是研发设计类，如CAE/CAD/EDA）的落后，并非因为底层的计算数学理论不行，而是源于一个极其复杂的“**系统性问题**”。这好比中国拥有世界顶级的建筑材料科学家（计算数学），但却很难造出像“CATIA”或“ANSYS”这样的“摩天大楼”（工业软件）。

困难主要来自以下几个方面：

1. 生态壁垒，而非技术壁垒：

- **成熟度与信任度**：工业软件的核心用户（大型车企、航空航天企业）追求的是**稳定、可靠、可信**。他们不敢用一款新软件去设计价值数亿的飞机或汽车，因为一旦出错，代价无法承受。国外软件（如ANSYS、Abaqus）经过数十年、无数工业场景的验证，建立了极高的信任壁垒。国产软件缺乏这种“被验证”的机会。
- **用户习惯与生态系统**：国外软件已经构建了完整的**生态系统**，包括教程、认证、咨询、二次开发社区等。工程师从大学开始学习的就是这些软件，整个工作流程都围绕它们搭建。替换成本极高。

2. 工程化与体系化的巨大挑战：

- **“论文” vs “产品”**：将一篇优秀的算法论文（原型）变成一个稳定、高效、鲁棒的工业软件模块，中间有巨大的**工程鸿沟**。这需要长期的代码迭代、成千上万的测试用例、针对不同硬件平台的优化、友好的用户界面开发等。这是一个需要**长期投入、静心打磨**的苦活累活。
- **体系化整合**：工业软件是**数千个算法模块**的精密集成。中国或许在某个特定算法上世界领先，但缺乏将所有这些模块（几何、网格、求解器、后处理）无缝整合成一个稳定、高效、统一体系的经验和工程能力。

3. 商业模式与投入的错配：

- **“重硬轻软”**：过去很长一段时间，国家和企业更愿意投资看得见摸得着的硬件设备，而对软件的价值认识不足，认为软件就是“代码”，不值钱。
- **研发投入差距悬殊**：全球领先的工业软件公司（如ANSYS、达索系统）每年研发投入高达数亿甚至数十亿美元，并且持续投入了三四十年。国内软件企业很难获得如此规模且**有耐心**的长期投资。
- **盗版冲击**：长期以来，国外软件盗版泛滥，虽然在短期内让用户用上了工具，但却彻底扼杀了国产软件赖以生存的市场土壤和正版化收入，无法形成“市场收入->反哺研发->产品升级->更大市场”的良性循环。

4. 产学研脱节：

- 高校和科研院所的评价体系倾向于发表论文而非开发工业软件。许多优秀的算法研究止步于论文和实验室原型，缺乏走向工程化和商业化的动力和渠道。
- 而工业界面临的实际问题，有时又无法快速反馈到学术界的研究中。

总结

中国计算数学的强大体现在基础科学的理论创新能力和顶尖人才的培养上。

工业软件的薄弱则是一个系统性的工程和生态问题，它涉及：

- 长期持续的巨额投入（钱）
- 深厚的工程化积累和体系整合（时间+经验）
- 健康的商业市场和用户生态（市场）
- 有效的产学研结合（机制）

结论就是：我们拥有建造“摩天大楼”的顶尖“材料科学家”，但我们缺乏组建“建筑设计师、工程师、施工队”并持续投资数十年去规划和建造一座“摩天大楼”的完整体系、耐心和商业环境。

当前，随着“卡脖子”问题的凸显，国家和产业界已经高度重视工业软件的发展。但要突破困境，绝非一朝一夕之功，需要的是战略定力、市场耐心和体系化的建设，而不仅仅是攻克几个算法难题。

1.4 神经网络在求解PDE中的价值、前景与可靠性评价

非常好的一個問題。神經網絡用於求解偏微分方程（PDE）是當前科學計算領域最前沿和熱門的方向之一。它既帶來了革命性的潛力，也面臨著嚴峻的挑戰。

我將從價值、前景、可靠性三個方面進行評價，並提供一個總結對比。

1. 价值与优势(Value & Advantages) 神经网络（特别是物理信息神经网络PINNs、深度算子网络DeepONet 等）为求解PDE带来了传统方法（如有限元FEM、有限差分FDM、有限体积FVM）所不具备的独特价值：

- **无网格法(Mesh-free)**: 这是最大的优势之一。传统方法需要生成复杂的计算网格，这对于几何形状复杂、动态变化的问题（如裂纹扩展、流固耦合）是极其耗时和技术门槛很高的步骤。神经网络完全避免了这一问题，只需在域内采点即可。
- **处理高维问题(High-dimensional Problems)**: 传统网格方法的计算成本随维度指数增长（维度灾难），这使得求解高维PDE（如量子动力学中的薛定谔方程、金融数学中的随机微分方程）几乎不可能。神经网络本质上非常擅长处理高维数据，为解决这类问题提供了新的路径。
- **逆问题的天然框架(Natural for Inverse Problems)**: 传统方法求解逆问题（即从观测数据反推物理参数或方程）通常非常困难，需要复杂的优化流程。而神经网络可以将未知参数作为可训练变量，与PDE的残差损失一起优化，自然地、端到端地解决正则化和反演问题。
- **解的表达能力(Solution Representation)**: 一个训练好的神经网络本身就是一个连续、可微的函数近似器。你可以直接在任何点求值，而不需要进行插值，并且可以轻松地计算高阶导数。
- **多物理场与参数化问题的效率**: 一旦训练好一个算子网络（如DeepONet），它可以近乎实时地预测在不同参数（如边界条件、方程系数、源项）下的解，这在传统方法中需要重复执行大量模拟，成本极高。

2. 前景(Prospects) 神经网络在PDE领域的前景非常广阔，主要集中在以下几个方向：

- **与传统方法的融合(Hybrid Methods)**: 这是最有希望的方向。未来不会是完全取代，而是结合。例如：
 - 使用神经网络为传统求解器提供初始猜测或预条件子，加速收敛。

- 使用神经网络学习复杂的本构关系（如湍流模型、材料模型），然后嵌入到成熟的传统求解器（如OpenFOAM, ABAQUS）中，提升其预测能力。这被称为“物理启发的机器学习”。
 - **加速科学发现(Accelerating Scientific Discovery)**: 从实验或模拟数据中发现隐藏的物理定律（即“符号回归”的升级版），甚至发现新的PDE形式。
 - **实时控制与数字孪生(Real-time Control & Digital Twins)**: 训练好的神经网络PDE求解器速度极快（前向传播仅需毫秒级），这使得它非常适合用于需要实时反馈的场景，如基于数字孪生的在线优化、控制和决策。
 - **专用硬件与算法协同设计**: 针对GPU、TPU等硬件特性专门设计的神经网络PDE求解算法将进一步提升其效率和适用范围。
- 3. 可靠性与挑战(Reliability & Challenges)** 这是目前阻碍神经网络PDE方法大规模工业应用的核心瓶颈。其可靠性受到以下几个关键挑战的制约：
- **训练不稳定与收敛性(Training Instability & Convergence)**:
 - 训练过程本质上是一个非凸优化问题，严重依赖初始化和超参数（学习率、损失函数权重等）。结果可能难以复现。
 - 存在“灾难性遗忘”现象：在优化PDE残差时，最初满足的边界/初始条件可能会在后续训练中被破坏。
 - **精度问题(Accuracy)**:
 - 要达到传统高阶方法（如高阶FEM、谱方法）的精度非常困难，通常需要巨大的网络和大量的训练点，计算成本可能反而更高。
 - 对于解中存在奇异性、间断性（如激波）的问题，神经网络难以捕捉，容易产生伪振荡。
 - **计算成本(Computational Cost)**:
 - 训练一个高精度的神经网络PDE求解器可能需要数小时甚至数天，而传统方法求解一个类似的问题可能只需几分钟。虽然训练好后预测很快，但离线训练成本高昂。
 - 对硬件的需求（大量GPU内存和算力）远高于传统方法。
 - **理论保证缺失(Lack of Theoretical Guarantees)**:
 - 传统数值方法有完善的数学理论支撑，如收敛性分析、稳定性分析、误差估计（先验和后验估计）。我们可以明确知道解的误差范围。
 - 神经网络作为黑箱模型，严重缺乏这类理论保证。我们无法确切知道解的误差有多大，也不知道它何时会失败。这对于航空、核能等安全攸关领域是致命的缺陷。
 - **泛化能力(Generalization)**:
 - 一个在特定参数下训练的模型，其泛化到未见参数范围的能力通常较弱，远不如传统方法“重新计算一次”可靠。

方面	评价	说明
价值	革命性、独特	提供了无网格、处理高维和逆问题的新范式，突破了传统方法的许多限制。
前景	极其广阔	最可能的路径是与传统方法融合，而非取代。在加速科学发现和实时应用方面潜力巨大。
可靠性	目前较低，是核心挑战	缺乏理论保证、训练不稳定、精度和成本问题使其在高可靠性要求的工业场景中尚难胜任。
当前定位	传统方法的补充，而非替代	非常适合探索性研究、参数化扫掠、逆问题。但在需要高精度、高可靠性的正向工程设计中，传统方法仍是黄金标准。

4. 总结与评价

神经网络为求解PDE打开了一扇全新的大门，让我们看到了解决一类传统计算方法无法解决的问题的希望。它是一个强大的**补充工具**，极大地扩展了科学计算的边界。

然而，在可预见的未来，它几乎不可能完全取代经过数十年发展、拥有坚实数学基础的传统数值方法（FEM, FVM, FDM）。两者关系更趋向于**共生与融合**：利用神经网络处理传统方法的痛点（如高维、逆问题、参数化），同时依靠传统方法提供可靠性保证和精度基准。

最终，一个混合了**物理模型**和**数据驱动方法**的多层次、多保真度建模与仿真框架，将是未来科学计算的主流方向。

1.5 我应不应该学计算数学或我应不应该选修偏微分方程数值解

计算数学的定位，介于

数学：深厚的数学功底、对物理世界的理解

艺术：格式设计先于算法实现，追求形式的优美，证明的简洁

工程：当硬件条件达标可实现后，需要大量的人力、财力、时间来实践，打磨代码

确定选计算数学？

在交叉领域的鄙视链：生物里面，计算有什么用？噪音没加，这些计算都没用

在数学领域的鄙视链：院士，南京大学张高飞

Remark 1.5.1

数学学科鄙视链浅析. 数学系的三个主流方向：**代数**、**几何** 和 **分析**。

鄙视链的形成

- 大家一起鄙视：**统计**，为什么呢？因为统计几乎就是应用数学
- 然后合着统计一起鄙视**计算数学**。计算数学用一个通俗点的名字就是**算术**，就你小时候学的那个，初中的就是代数几何，大学才学分析嘛，所以算术被鄙视不奇怪
- 计算数学分离出一个学科叫做**计算机科学**（*Computer Science, CS*），当然我们国家有些学校，比如清华，是从自动化系分出来的**EE**和**CS**，但是西方国家多数都是从数学系分出来的计算机科学

- 所以在一些大学，比如西方大学，你可以在 *Science*, *Arts* 或者 *CS* 三个系里面选计算机科学这个 *major*，就是这个道理。数学本身是形式科学，是广义的科学，但不属于狭义的科学。广义的科学包括自然科学（狭义的 *Science*）、社会科学（西方叫做 *Arts*）和数学（形式科学）。所以数学系的毕业生，可以选择 *Bachelor of Science* 或者 *Bachelor of Arts* 两种学位，看它毕业时候，侧重于哪方面的应用，是应用在自然科学多一点，那就是前者，应用在社会学多一点，那就是后者。
- 所以你可以同时在 *Science*, *Arts*, *CS* 三个系里面选计算机科学这个 *major*，没毛病
- 计算机科学学的算法什么就是计算数学，最早计算机技术发明出来，就是给数学家们当计算器用的，没毛病
- 计算机科学鄙视计算机技术、软件工程 这些学科，为什么呢？因为这些技术工程就是纯粹的应用，甚至没有用到多少数学，比如 *C*, *Java* 这些都是计算机技术，还包括操作系统、数据库

完整的鄙视链 完整的学科鄙视链可表示为：

代数 = 几何 \geq 分析 $>$ 统计 $>$ 计算数学/计算机科学 $>$ 计算机技术/软件工程

现实考量

- 越靠左，越需要脑子，真的难
- 越靠右，就越简单，所以我就说嘛，*Java* 什么，学 *Arts* 的女孩子学起来一点问题没有，不需要数学，你英语好一点加成还更多，学得更快，哦耶
- 但是越靠右的东西，越赚钱
- 靠左的学科名气大，靠右的学科容易赚钱，越是应用，就越赚钱，因为公司企业都需要，工作就越好找

结论 因为大多数人用计算机技术，是用来娱乐和代替体力劳动的，比如简单的搬运数据，画个漂亮的风景画，发送到每个人的手机上，这些最来钱。但是代替脑力劳动，这个需要人脑介入，这个一般人欣赏不来，所以你就算能做这些东西，一般人也不会因此给你钱。不能赚钱就只能靠国家政府拨款养着了，所以科学这种东西，本来历史上就是西方贵族衣食无忧时候搞的。普通人，还是多搞点技术吧。

Remark 1.5.2 南京大学数学系张高飞老师语录

正如大家所知，代数几何是现代数学的主流。当代大多数一流的数学家都工作在这一领域。因此如果你觉得自己天赋异禀，并在代数、几何与分析各方面都有着扎实的基础，我建议你绝不要浪费自己的天赋：应义无反顾的选择代数几何这一专业。当然把代数、几何与分析这三门基础功课同时学好的人很少。比如有些同学有着很好的分析功底，但代数中的抽象思维能力却相对显得薄弱。如果是这样的话，我建议你选择分析方面的专业，比如：复分析、分形、调和分析或微分方程。

如果你代数和几何都不怎么样，可却在几何方面有着良好的感觉，要是这样的话，我建议你应和梅加强老师好好探讨一下。让他帮你判断一下看自己是不是可以学习几何。

除以上三部分同学之外，还有这样的一部分同学：他们对代数、分析与几何都不擅长，但却一直坚信自己在数学上仍能有所作为，并幻想有朝一日成为中国数学界的中流砥柱。如果你属于这部分同学中的一位的，我建议你选择动力系统。动力系统这一学科其实就是专门为这部分同学开设的。

当然即使是动力系统也不是人人都能学的。因为动力系统需要大量的微积分。可总有那么一部分同学还没来得及把极限的概念搞清楚就大学毕业了。如果你不巧就是这样的一位同学，也就是说你大学四年压根儿

就没学数学，但仍希望自己将来能在数学上一展宏图的话，我建议你选择组合数学这一专业。这一专业的特点就是它只用到中学的数学。如果你在中学时参加过数学竞赛并获过奖项的话，这一学科正是你大展身手的地方。

我想大多数同学看到这儿之前已经找到了适合自己的专业了。可若仍有人羞怯的说他在中学时早恋，因此连中学的数学也没学好，我想告诉这部分同学不要怕。在我们系有专门为你们开设的一个专业：统计学。这一学科只要求懂得小学数学中的加减乘除四则运算就够了。更重要的是，选择这一专业的大都是女同学。在你准确无误的把成千上万个数据加起来并娴熟的计算出他们的均值时，你也赢得了众多师姐师妹的芳心：短短三年的研究生生活或许能让你再次体会一次那如花美眷，似水流年的往事。。

最后这一条是专门针对那些悲情人物的。他们连小学的数学也没学好。不要说把上千个数加起来，就是把两个数加起来，对他们来说都是件很吃力的事。然而这一切丝毫没有削弱他们对数学的一片痴情。他们日日夜夜泡在图书馆里。他们翻阅了所有的数学文献，却从未找到一本能读懂的。但他们仍坚持不懈，为的就是找到一个适合自己的专业。他们的行为感动了上帝。上世纪的某一天，上帝为他们创造了一台机器帮他们计算。这就是计算机。借助计算机，他们可以很快地进行加减乘除的运算。这就是计算数学。

1.6 What are Partial Differential Equations

Partial Differential Equations (PDEs) are widely used in science and engineering.

The most general second-order PDE in two independent variables, x and t , takes the form

$$F(x, t, u, u_t, u_x, u_{tt}, u_{xx}, u_{xt}) = 0.$$

However, F usually takes some particular form arising from physics, economy, etc. Some examples of PDEs are:

1. $u_t + cu_x = 0$ (transport).
2. $u_{tt} - c^2 u_{xx} = 0$ (vibrating string).
3. $u_{tt} - c^2 \Delta u = 0$ (vibrating drumhead or acoustic wave).
4. $u_t - ku_{xx} = 0$ (diffusion).
5. $c\rho u_t = \nabla \cdot (\kappa \nabla u)$ (heat flow).
6. $-\hbar^2 u_{tt} = (\hbar^2/(2m))\Delta u + (e^2/r)u$ (hydrogen atom)
7. $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = 0$ (fluid or Navier-Stokes)
 $\rho(\frac{\partial u}{\partial t} + u \nabla u) = -\nabla p + f$
8. $\nabla \cdot E = \rho/\epsilon_0$ (Maxwell equations or electromagnetic wave)
 $\nabla \cdot B = 0$
 $\nabla \times E = -\frac{\partial B}{\partial t}$
 $\nabla \times B = \mu_0(J + \epsilon_0 \frac{\partial E}{\partial t})$
9. $u_t + \frac{1}{2}\sigma^2 x^2 u_{xx} + rxu_x - ru = 0$ (Black-Scholes)

See multiscale modeling in Fig. 1.1.

1.7 Linear and Nonlinear PDEs

Write the equation in the form $Lu = 0$, where L is an operator. The definition for linearity is

$$L(cu + dv) = cLu + dLv,$$

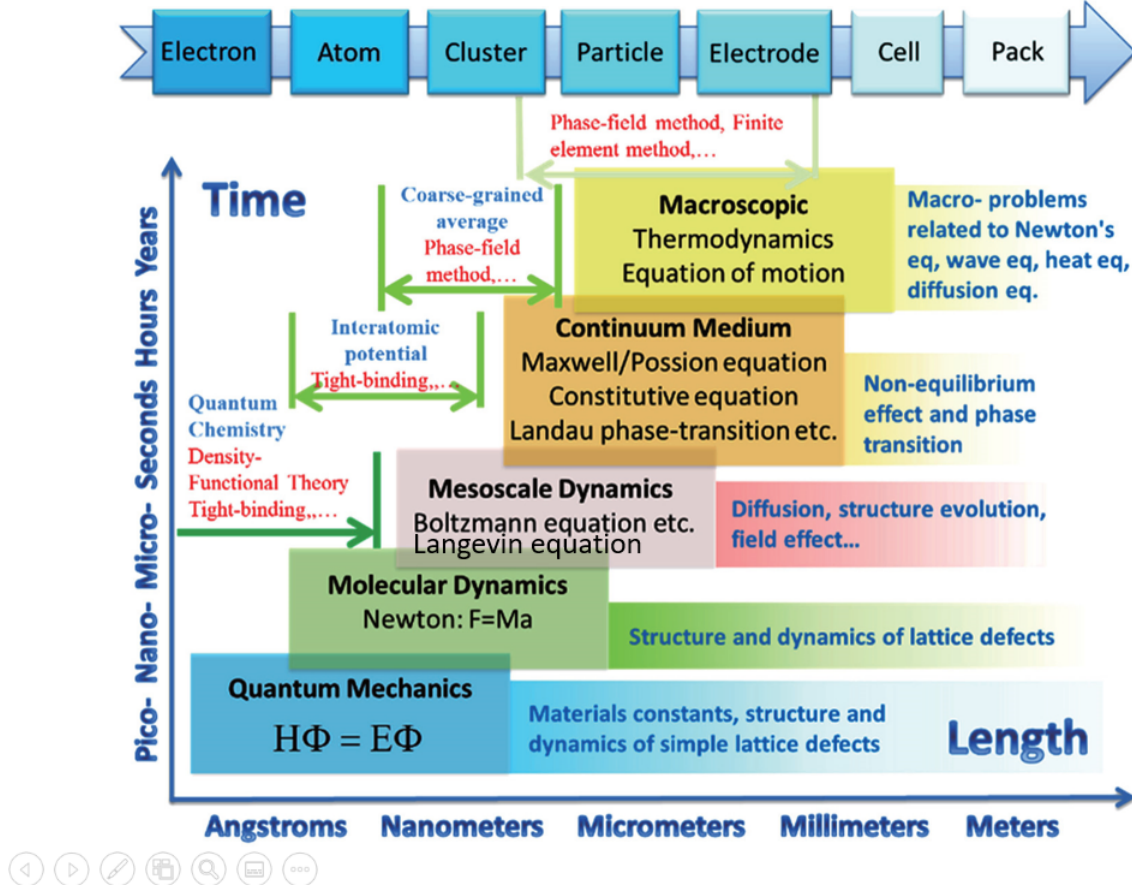


Figure 1.1: Multiscale modelling.

for any functions u, v and any constants c, d . The equation

$$Lu = g,$$

is called a homogeneous linear equation for $g = 0$ whereas it is called a nonhomogeneous linear equation for $g \neq 0$. A PDE that is not linear is called a nonlinear PDE.

1.8 Three Classes of Linear Second-Order Equations

The general quasilinear second-order equation takes the form

$$\sum_{i,j=1}^m a_{ij} \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} + \sum_{i=1}^m b_i \frac{\partial u}{\partial x_i} + cu = f.$$

The equations are grouped into three classes according to the SPD matrix $A = [a_{ij}]$.

Hyperbolic equations include:

$$\begin{aligned} u_{tt} - a^2 \Delta u &= f, & \text{acoustic wave} \\ u_t + au_x &= 0, & \text{advection} \\ u_t + uu_x &= 0, & \text{inviscid Burgers' equation} \end{aligned}$$

Parabolic equations include:

$$\begin{aligned}u_t &= au_{xx}, \quad \text{heat equation} \\u_t &= \nabla \cdot (\kappa \nabla u) + f, \quad \text{diffusion equation}\end{aligned}$$

Elliptic equations include:

$$\begin{aligned}\Delta u &= f, \quad \text{Poisson} \\ \Delta u &= 0, \quad \text{Laplace} \\ c_{ij} \nabla_i \nabla_j u + b_i \nabla_i u &= f, \quad \text{Kolmogorov-Backward} \\ \nabla_i \nabla_j (c_{ij} u) + \nabla_i (b_i u) &= f, \quad \text{Fokker-Planck}\end{aligned}$$

1.9 Boundary Conditions and Initial Conditions

The initial condition for wave equation is

$$u(x, 0) = \varphi(x), \quad u_t(x, 0) = \psi(x).$$

The initial condition for the advection equation is

$$u(x, 0) = \varphi(x).$$

There is no boundary condition for Cauchy problem and the problem without boundary.

The Dirichlet boundary condition is

$$u|_{\partial\Omega} = g.$$

The Neumann boundary condition is

$$\frac{\partial u}{\partial n}|_{\partial\Omega} = g.$$

The Robin boundary condition is

$$(\frac{\partial u}{\partial n} + \alpha u)|_{\partial\Omega} = g.$$

There is also periodic boundary condition. For the interface problem, more boundary conditions are proposed on the interface.

In general, the goal of PDE is to 1) find the solution or properties of the solution of PDEs; 2) well-posedness of the PDE problem, that is, existence, uniqueness, stability. For numerical PDEs, we theoretically only focus on the **error estimate**.

Several techniques are required:

- **maximum principles**
- **Fourier methods**
- **energy estimates**
- **Green's functions**
- **Galerkin projection**

1.10 Conservation Laws, Constitutive Relations, Dimensionless Analysis (Convection-Diffusion Equation)

1.10.1 Conservation Laws

Consider the balance of heat in an arbitrary subset $\Omega_0 \subset \Omega$ with boundary Γ_0 . The energy principle says that the rate of change of the total energy in Ω_0 equals the inflow of heat through Γ_0 plus the heat power produced by heat sources inside Ω_0 . To express this in mathematical terms we introduce some physical quantities, each of which is followed, within brackets, by the associated standard unit of measurement.

With $e = e(x, t)$ [J/m³] the density of internal energy at the point x [m] and time t [s], the total amount of heat in Ω_0 is $\int_{\Omega_0} e \, dx$ [J]. Further with the vector field $j = j(x, t)$ [J/(m²s)] denoting the heat flux and n the exterior unit normal to Γ_0 , the net outflow of heat through Γ_0 is $\int_{\Gamma_0} j \cdot n \, ds$ [J/s]. Introducing also the power density of heat sources $p = p(x, t)$ [J/(m³s)], the energy principle then states that

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_0} e \, dx = - \int_{\Gamma_0} j \cdot n \, ds + \int_{\Omega_0} p \, dx.$$

Applying the divergence theorem we obtain

$$\int_{\Omega_0} \left(\frac{\partial e}{\partial t} + \nabla \cdot j - p \right) dx = 0, \quad \text{for } t > 0.$$

Since $\Omega_0 \subset \Omega$ is arbitrary this implies

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \nabla \cdot j = p \quad \text{in } \Omega, \quad \text{for } t > 0. \quad (1.1)$$

1.10.2 Constitutive Relations

The internal energy density e depends on the absolute temperature T [K] and the spatial coordinates, and in our first constitutive relation we assume that e depends linearly on T near a suitably chosen reference temperature T_0 , that is,

$$e = e_0 + \sigma (T - T_0) = e_0 + \sigma \vartheta, \quad \text{where } \vartheta = T - T_0. \quad (1.2)$$

The coefficient $\sigma = \sigma(x)$ [J/(m³K)] is called the specific heat capacity. (It is usually expressed in the form $\sigma = \rho c$, where ρ [kg/m³] is mass density and c [J/(kg K)] is the specific heat capacity per unit mass.)

According to **Fourier's law** the heat flux due to conduction is proportional to the temperature gradient, which gives a second constitutive relation,

$$j = -\lambda \nabla \vartheta.$$

The coefficient $\lambda = \lambda(x)$ [J/(m K s)] is called the *heat conductivity*. In some situations (e.g., gas in a porous medium, heat transport in a fluid) heat is also transported by convection with heat flux ve , where $v = v(x, t)$ [m/s] is the convective velocity vector field. The constitutive relation then reads

$$j = -\lambda \nabla \vartheta + ve. \quad (1.3)$$

Substituting (1.2) and (1.3) into (1.1) we obtain

$$\sigma \frac{\partial \vartheta}{\partial t} - \nabla \cdot (\lambda \nabla \vartheta) + \nabla \cdot (\sigma v \vartheta) = q \quad \text{in } \Omega, \quad \text{where } q = p - \nabla \cdot (ve_0), \quad (1.4)$$

which is the *heat equation* with convection.

1.10.3 Boundary Conditions

In the modelling of heat conduction, the differential equation (1.4) is combined with an initial condition at time $t = 0$,

$$\vartheta(x, 0) = \vartheta_i(x),$$

and a boundary condition, expressing that the heat flux through the boundary is proportional to the difference between the surface temperature and the ambient temperature, $j \cdot n = \kappa(\vartheta - \vartheta_a)$, where $\kappa = \kappa(x, t)$ [J/(m²sK)] is a heat transfer coefficient. Assuming that the material flow does not penetrate the boundary, i.e., $v \cdot n = 0$, we obtain from (1.3)

$$j \cdot n = -\lambda \nabla \vartheta \cdot n = -\lambda \frac{\partial \vartheta}{\partial n} \quad \text{on } \Gamma.$$

Therefore, this results in a *Robin boundary condition*

$$\lambda \frac{\partial \vartheta}{\partial n} + \kappa (\vartheta - \vartheta_a) = 0 \quad \text{on } \Gamma.$$

One limit case $\kappa = 0$ means that the boundary surface is perfectly insulated, so that we have *Neumann boundary condition*,

$$\frac{\partial \vartheta}{\partial n} = 0.$$

The other limit, letting $\kappa \rightarrow \infty$, we obtain Dirichlet boundary condition

$$\vartheta = \vartheta_a.$$

The limit case $\kappa = \infty$ thus means that the body is in perfect thermal contact with the surroundings, i.e., heat flows freely through the surface, so that the surface temperature of the body is equal to the ambient temperature.

Notice that one initial and two boundary conditions are needed for 1D interval problem.

1.10.4 Dimensionless Analysis

It is often useful to write the above equations in dimensionless form. Choosing reference constants L [m], τ [s], ϑ_f [K], σ_f [J/(m³K)], v_f [m/s], etc., we define dimensionless variables

$$t^* = t/\tau, \quad x^* = x/L, \quad u^*(x^*, t^*) = \vartheta(x^*L, t^*\tau)/\vartheta_f.$$

In order to make the heat equation (1.4) dimensionless we divide it by $\lambda_f \vartheta_f / L^2$ and we eventually obtain

$$d \frac{\partial u^*}{\partial t^*} - \nabla^* \cdot (a \nabla^* u^*) + \nabla^* \cdot (b u^*) = f, \quad \text{in } \Omega^*,$$

where

$$d = \frac{L^2 \sigma_f}{\tau \lambda_f} \frac{\sigma}{\sigma_f}, \quad a = \frac{\lambda}{\lambda_f}, \quad b = \frac{v_f \sigma_f L}{\lambda_f} \frac{\sigma}{\sigma_f} \frac{v}{v_f}, \quad f = \frac{L^2}{\lambda_f \vartheta_f} q.$$

It is natural to choose $\tau = L^2 \sigma_f / \lambda_f$, so that $d = 1$ if $\sigma = \sigma_f$ is constant. The dimensionless number $Pe = v_f \sigma_f L / \lambda_f$ that appears in the definition of b is called Peclet's number and measures the relative strengths of convection and conduction. The boundary condition and the initial condition transform in a similar way.

1.11 Mass Conservation and Continuity Equation

We derive the continuity equation from the mass conservation for the fluid,

$$\int_D (\rho|_{t=t_2} - \rho|_{t=t_1}) dx = - \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{\partial D} \rho v \cdot n ds.$$

Using the Gauss Divergence Theorem, we arrive at

$$\int_{t_1}^{t_2} dt \int_D \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v) \right] dx = 0.$$

Since D and $[t_1, t_2]$ are arbitrary, the continuity equation reads

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v) = 0.$$

constant velocity: $\frac{\partial \rho}{\partial t} + v \cdot \nabla \rho = 0$.

incompressible: $\nabla \cdot v = 0$ so that the material derivative vanishes, $\frac{D\rho}{Dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + v \cdot \nabla \rho = 0$.

irrotational fluid: $\text{rot } v = \nabla \times v = 0$, irrotational flow implies potential flow $v = \nabla \phi$.

incompressible + irrotational: $\nabla \cdot v = \nabla \cdot \nabla \phi = \Delta \phi$ harmonic Laplace equation.

1.12 Variational Principle and Equivalence of Three Types of Formulation for Elliptic Problems

Let

$$J(v) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} (|\nabla v|^2 + v^2) dx + \frac{1}{2} \int_{\partial \Omega} \alpha(x) v^2 ds - \int_{\Omega} f v dx - \int_{\partial \Omega} g v ds,$$

where $\alpha(x) \geq 0$. Consider the following three problems:

I. (Variational Problem) Find $u \in H^1(\overline{\Omega})$ such that

$$J(u) = \min_{v \in H^1(\overline{\Omega})} J(v).$$

II. (Weak Form) Find $u \in H^1(\overline{\Omega})$ such that

$$\int_{\Omega} (\nabla u \cdot \nabla v + uv - f) dx + \int_{\partial \Omega} (\alpha(x) uv - gv) ds = 0,$$

for any $v \in H^1(\overline{\Omega})$.

III. (Classical Solution) Find $u \in C^2(\Omega) \cap C^1(\overline{\Omega})$ satisfying

$$\begin{cases} -\Delta u + u = f, & x \in \Omega, \\ \frac{\partial u}{\partial n} + \alpha(x)u = g, & x \in \partial \Omega. \end{cases}$$

Prove that problems I, II, III are equivalent when $u \in C^2(\Omega) \cap C^1(\overline{\Omega})$.

1.13 Normed Vector Spaces

A *multi-index* $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_d)$ is a d -tuple where the α_i are non-negative integers. The order (or length) $|\alpha|$ of a multi-index α is defined by $|\alpha| = \sum_{i=1}^d \alpha_i$. Given a function $v : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$, we may write its partial derivatives of order $|\alpha|$ as

$$D^\alpha v = \frac{\partial^{|\alpha|} v}{\partial x_1^{\alpha_1} \partial x_2^{\alpha_2} \dots \partial x_d^{\alpha_d}}.$$

A linear partial differential equation of order k in Ω can therefore be written

$$\sum_{|\alpha| \leq k} a_\alpha(x) D^\alpha u = f(x),$$

where the coefficients $a_\alpha(x)$ are functions of x in Ω . We also use subscripts to denote partial derivatives, e.g.,

$$v_t = D_t v = \frac{\partial v}{\partial t}, \quad v_{xx} = D_x^2 v = \frac{\partial^2 v}{\partial x^2}.$$

For $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ we denote by $C(\Omega)$ the linear space of continuous functions on Ω , and for bounded continuous functions we define the maximum-norm

$$\|v\|_{C(\Omega)} = \sup_{x \in \Omega} |v(x)|. \quad (1.5)$$

When Ω is a bounded and closed set, i.e., a compact set, the supremum in (1.5) is attained and we may write

$$\|v\|_{C(\Omega)} = \max_{x \in \Omega} |v(x)|.$$

For a not necessarily bounded domain Ω and k a non-negative integer we denote by $C^k(\Omega)$ the set of k times continuously differentiable functions in Ω . For a bounded domain Ω we write $C^k(\bar{\Omega})$ for the functions $v \in C^k(\Omega)$ such that $D^\alpha v \in C(\bar{\Omega})$ for all $|\alpha| \leq k$. For functions in $C^k(\Omega)$ we use the norm

$$\|v\|_{C^k(\Omega)} = \max_{|\alpha| \leq k} \|D^\alpha v\|_{C(\Omega)},$$

and the seminorm, including only the derivatives of highest order

$$|v|_{C^k(\bar{\Omega})} = \max_{|\alpha|=k} \|D^\alpha v\|_{C(\bar{\Omega})}.$$

When we are working on a fixed domain Ω we often omit the set in the notation and write simply $\|v\|_C, |v|_{C^k}$, etc.

By $C_0^k(\Omega)$ we denote the set of functions $v \in C^k(\Omega)$ that vanish outside some compact subset of Ω , in particular, such functions satisfy $D^\alpha v = 0$ on the boundary of Ω for $|\alpha| \leq k$. Similarly, $C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ is the set of functions that have continuous derivatives of all orders and vanish outside some bounded set.

We say that a function is smooth if, depending on the situation, it has sufficiently many continuous derivatives.

We also frequently employ the space $L^2(\Omega)$ of square integrable functions with scalar product and norm

$$(v, w) = \int_{\Omega} v w \, dx, \quad \|v\|_{L^2(\Omega)} = \left(\int_{\Omega} v^2 \, dx \right)^{1/2}.$$

For Ω a domain we also employ the Sobolev space $H^k(\Omega)$, $k \geq 1$, of functions v such that $D^\alpha v \in L^2(\Omega)$ for all $|\alpha| \leq k$, equipped with the norm and seminorm

$$\begin{aligned}\|v\|_{H^k(\Omega)} &= \left(\sum_{|\alpha| \leq k} \|D^\alpha v\|^2 \right)^{1/2}, \\ |v|_{H^k(\Omega)} &= \left(\sum_{|\alpha|=k} \|D^\alpha v\|^2 \right)^{1/2}.\end{aligned}$$

1.14 Numerical Methods

finite difference method

finite element method

finite volume method

spectral method

boundary integral method

mesh-free method

neural networks

Bibliography