

理論科學研究中心

Center for Advanced Study in Theoretical Sciences

2014 暑假數學建模與科學計算短期課程

二十世紀中葉至今天，隨著電腦的發明與應用，數學對於人類社會越發重要，產生極大衝擊；**數據化與數學化**的趨勢，大規模的改變我們世界。數據化就是把各種現象變化轉成某些直接數據或替代參數，數學化就是利用數學模式將這些參數的關係找出來，從此架構我們的各種知識；數學模式也可以結合有限的觀測，補足資料之不足，形成相對完整的資料。數學模式也被廣泛地進行工程與科學實驗、預報與檢驗我們的知識，發展我們的知識系統。常被引用的 STEM (Science, Technology, Engineer, and Mathematics) 都須正視這些**數據化與數學建模**的發展，針對**跨尺度、非線性的科學研究**，或是**複雜系統**的研究，數學模式更是唯一的實驗工具。

數學是科學的語言，電腦科學家 Turing 曾說過『數學模式是對問題的簡化與理想化(甚至虛假化)。但數學模式在現有知識架構下，保留最重要的問題特性以供討論，進而協助研究未知瞭解科學。』數學模式就是以數學符號與觀念對自然界事物進行表達與分析的工具，我們透過模式觀察理解周遭事物。隨著電腦的進步，資料大幅度的數位化。數學建模、科學計算、分析詮釋與驗證等過程，更是現今數學科學的典範，本短課程透過簡單數學模式與重要實用例子說明 1)控制方程式的尋求；2)計算解與分析；3)科學詮釋等三個數學建模過程。第一、三部分的模式例子包含許多當代物理科學、生命科學、防疫學、生態學、地球科學(氣象數學建模)以及人文社會科學等領域；第二部分科學計算與解的部分，課程會簡單介紹下列五個重要的工作面向：

1. 子程式或 Library 程式層次:程式語言與計算方法或演譯法密切結合,類似 subroutine 完整的副程式或子程式的撰寫能力，學習過程要處理資料量超大的問題或具挑戰性問題，要重視計算效率(efficiency)。
2. 數學建模層次 Mathematical modeling:重視許多個別副程式的系統整合成數學模式，使用模式解決具體科學或工程問題，發展有具體目標與 project based 的模式，這個層次的撰寫須重視團隊溝通合作，也重視學界與業界合作，理論與應用合作。
3. 分析診斷層次:大量資料需要發展好的動力物理分析方法，統計分析，data mining，資料視覺化技術(visualization)以及儲存技術。
4. 整合模式與資料的應用:資料同化(Data assimilation)，預報科學技術 (forecast science technology)，模式的改善(model improvement by data)等。
5. 與硬體發展與使用者服務端的互動。

● **講者**：郭鴻基教授 (國立臺灣大學) / 鄧君豪教授 (國立中興大學)

理論科學研究中心

Center for Advanced Study in Theoretical Sciences

2014 暑假數學建模與科學計算短期課程

High-order numerical methods for time-dependent partial differential equations

Prof. Chun-Hao Teng

Department of Applied Mathematics, National Chung Hsing University

Wave simulations are very important for analyzing science and engineering problems. The fundamental block of this computational approach is constructing and implementing a numerical algorithm that is reliable in the sense of accurate and stable computations. Since many wave problems are described by partial differential equations (PDEs), developing reliable algorithms for these problems, thus, involves mathematical theories both at the theoretical PDE and numerical computational levels. Frankly speaking, such a scheme developing procedure is not trivial and great care must be exercised.

In these lectures, we will present a methodology on the theory and application of high-order accurate numerical methods for time-dependent PDEs. We will first use model wave problems to review some basic ideas of numerical computations based on difference methods. Followed by the basic concepts we then present theory related to constructing high-order schemes based on spectral/pseudospectral method for PDEs. In the third part of this lecture we will illustrate how to extend, integrate, and apply these basic concepts to construct accurate and stable numerical schemes for wave problems beyond one dimensional space. In the last lecture we shall present an application of this numerical approach for a realistic scientific problem, surface enhanced Raman scattering (SERS) computations.

● 議 程 :

	Aug. 25 (Mon.)	Aug. 26 (Tue.)
09:00 10:30	郭鴻基教授： 向量微積分及科學應用 Vector calculus and application	郭鴻基教授： 變分與微分方程式的數學建模應用 Calculus of variation and PDE
10:40 12:10	郭鴻基教授： 向量微積分及科學應用 Vector calculus and application	郭鴻基教授： 變分與微分方程式的數學建模應用 Calculus of variation and PDE
13:30 15:00	鄧君豪教授： Lecture 1. Basic concepts of numerical PDEs. • truncation error, stability, and convergence of a scheme • von Neumann analysis and energy method	鄧君豪教授： Lecture 3: Methods for 2D elastic wave problems • stress-velocity formulation, symmetric hyperbolic equations, characteristic boundary conditions
15:10 16:40	鄧君豪教授： Lecture 2. High-order numerical methods for PDEs. • high-order accurate methods and phase error analysis • penalty method for stable imposition of boundary conditions	鄧君豪教授： Lecture 4: Application of high-order methods • pseudospectral methods for SERS computations

● 地 點：臺灣大學數學研究中心 101 教室 (原新數學館)

● 主持人：郭鴻基教授(國立臺灣大學)