

科学与工程计算研究的回顾与展望^{*}

余德浩

(计算数学与科学工程计算研究所 北京 100080)

摘要 科学计算的兴起是 20 世纪后半叶最重要的科技进步之一。计算与理论及实验相并列, 已经成为当今世界科学活动的第三种手段。回顾了半个世纪来我国科学计算事业的发展历程及计算数学家和其他科学计算专家的重要贡献, 介绍了国家重点基础研究发展规划相关项目的研究内容, 并展望了我国科学计算事业在新世纪初的发展前景。

关键词 科学工程计算, 计算数学



1 第三种科学手段

科学与工程计算
是伴随着电子计算机
的出现而迅速发展并
获得广泛应用的一门
新兴交叉科学, 是计
算机实现其在科学与
高新技术领域应用的
必不可少的工具。科
学和工程计算已被列
为 20 世纪最重要的
科技进步之一^[1]。

数千年来人类一直是通过理论和实验这两种手段探索科学的奥秘。但复杂的科学和工程问题往往难以用理论方法求解, 而实验方法也有很大的局限性, 社会发展和科技进步呼唤着新的科学方法。上世纪 40 年代电子计算机的发明为计算成为

第三种科学手段提供了可能。这一有巨大潜力的计算工具使人的计算能力获得了过去无法想象的提高, 延伸和强化了人的智能, 影响了人类所涉足的一切科技领域, 具有划时代的重大意义。半个多世纪以来, 计算机的飞速发展已把计算推向人类科学活动的前沿, 它作为科学方法的地位在不断上升。计算克服了理论分析及实验手段的局限, 是自伽利略、牛顿以来科学方法论的最伟大的进步, 正推动着科学实践的深刻变革。

数十年来, 在自然科学和工程科学中, 已先后产生了计算力学、计算物理等一系列计算性的分支学科。计算数学正是这许多交叉学科的纽带和共同基础。不同的学科、不同的工程应用会提出许多不同的实际问题, 但它们往往又可能归结为若干类典型的数学问题。解决了典型问题的数值求解方法, 也就同时解决了许多不同学科、不同工程应用中的计算问题。

^{*} 收稿日期: 2001 年 10 月 8 日

求解不同类型的科学问题要有不同的计算方法。一方面要寻找更加有效、更能发挥计算机功能的新型算法去解决老问题;另一方面,要针对科学研究和工程技术不断提出的新问题设计新的高性能算法。同时,计算机的不断更新换代,也要求计算方法不断发展。计算方法是科学与工程计算的核心,构造好的计算方法与研制高性能计算机及高效率软件同等重要。计算的功效是计算工具的能力与计算方法效率的乘积。计算数学的中心任务就是要给出用计算机更有效地求解实际问题的计算方法。计算方法的改进将能使计算机的作用得到充分的发挥,而计算数学提出的要求也将有力地推动计算机的发展与更新^[2]。

科学和工程计算的能力与发展水平是一个国家综合国力的重要标志。世界上各发达国家都极其重视这一领域,投入大量资金予以支持。美国在科学和工程计算方面长期处于领先地位,但美国科学界仍不断向政府呼吁,要充分重视科学工程计算领域的国际竞争。1983 年美国国防部、国家基金会、能源部及国家宇航局联合组织了以著名数学家拉克斯(P. Lax)为首的专门委员会向政府提出了大力发展科学与工程计算的报告。1993 年美国科学、工程和技术联邦协调理事会也向国会提交了题为“重大的挑战项目:高性能计算和通讯”报告,并被作为总统财政预算的附件。1996 年美国能源部提出了“加速战略计算创新”(ASCI)计划。1999 年美国总统科学委员会又提出“21 世纪的信息技术:对美国未来的大胆投资”,即 Π^2 计划,将科学计算列为重点。

2 中国的科学与工程计算

在科学与工程计算研究领域,我国学者做出了许多杰出的贡献。他们为我国科学和工程计算的众多实际问题提供了许多有效的算法,进行了大量有实际应用价值的计算,不少成果还具有国际领先水平,使我国的科学和工程计算在国际上占有重要的一席之地。

从 50 年代开始,我国就形成了一支活跃的、高水平的计算数学与科学工程计算研究队伍,分布在中国科学院、高等院校和各产业部门。近半个世纪

来,这支队伍在中国计算机硬件设备长期落后的条件下,善于发挥自己特有的智力优势,团结协作,创造性地解决了国家经济和国防建设中的许多问题,为原子弹氢弹的研制、人造卫星上天、远程运载火箭的发射以及在石油勘探、气象预报、机械制造、水利工程、土木建筑、生态环境、生化医学等许多领域做出了重要贡献。例如核武器的研制只靠实验和理论不能完全解决问题,何况做一次实验要付出巨大的代价,必须采用计算的方法。计算工作者为我国成功地独立自主发展核武器做出了历史性的贡献。又如我国独立于西方开创了有限元方法。这一方法特别适用于大型工程计算,在水坝、桥梁、飞机、船舶的设计以及油田开发和核武器研制等方面得到了广泛的应用。再如在我国导弹与航天技术研究方面,也正是计算数学工作者针对飞行器头部气动力以及烧蚀、飞行控制和结构分析等问题发展了一系列有效算法,较好地解决了计算问题,从技术上满足了航天事业发展的需要。近年科学计算在大气、海洋和环境科学的研究中也取得了令人瞩目的成绩,由于应用了辛几何格式、平方守恒格式及并行计算等技术,其数值模拟的效果大幅度提高。

40 余年来,我国的计算数学家也取得了许多既有国际领先的理论水平、又有非常广阔的应用前景的创造性成果,开辟了一些新的研究方向,极大地丰富了计算数学的理论宝库。其中冯康院士的成就尤其突出^[3]。

冯康等独立于西方创始的有限元方法是当代计算数学和科学工程计算的一项重大成就。50 年代末,冯康领导的科研小组承担了应用计算机计算一系列水坝建设中大型弹性力学问题的国家任务。为了克服传统计算方法难以处理几何与材料的复杂性以及缺乏理论保证的困难,冯康等开辟了椭圆型方程计算方法的系统研究,在大量计算经验的基础上,通过系统的理论分析,把变分原理与剖分逼近有机结合,把传统上对立而又各具优点的差分法与能量法辩证统一,创造出有限元方法,形成了标准的算法形态,编制了通用的有限元程序,及时解决了当时我国大型水坝的应力分析问题,并于 1965

年发表论文,在极其广泛的条件下证明了方法的收敛性和稳定性,给出了误差估计,从而奠定了有限元方法的严格的数学理论基础,为其实际应用提供了可靠的理论保证。有限元方法的创始是当代计算方法进展的一个里程碑,意义重大,影响深远。近 40 年来,这一方法已发展成为一个独立的分支学科,并如前所述,已在科学和工程计算的极其广泛的领域得到重要应用。不久前去世的法国利翁斯(J. L. Lions)院士早在 1981 年便指出:“中国学者在对外隔绝的环境下独立创始了有限元方法,在世界上属最早之列。今天这一贡献已为全人类所共享”。美国拉克斯(P. Lax)院士于 1993 年也曾写道:“冯康独立于西方并行地创造了有限元方法的理论,在方法的实现及其理论基础的创立两方面都做出了贡献”。丘成桐教授 1997 年曾评价冯康教授的有限元计算是“中国近代数学能超越西方或与之并驾齐驱,在数学历史上很出名的三个主要工作”之一。

在数学物理方程的谱系中,列于首位的是经典力学方程,它有三种等价的数学形式体系,其中哈密顿体系一直是物理学理论研究的出发点,它的应用涉及物理、力学和工程的众多领域。但是针对哈密顿体系的计算方法直至 80 年代初仍是空白。冯康于 1984 年首次系统地提出了哈密顿系统的辛几何算法。他和他的研究小组经过十多年的努力取得了一系列重要成果。传统的算法除少数例外,几乎都不是辛算法,不可避免地带有耗散性等歪曲体系特征的缺陷。而冯康等人提出的为数众多的新算法却保持了体系结构,特别在稳定性与长期跟踪能力上具有独特的优越性。这一成果得到国际知名学者的高度评价,带动了国际上这一方向的一系列研究,并已在我国的动力天文、大气海洋、分子动力学等领域的计算中得到了成功的应用。计算表明,辛算法相对于传统算法有明显的优越性。这一类新算法的出现甚至已改变了某些学科的研究途径,并将在更多的领域得到更广泛的应用。这一成果获得了 1997 年国家自然科学奖中惟一的一项 1 等奖。这是当时国家对自然科学研究成果的最高奖励。

除了冯康院士的杰出贡献外,周毓麟院士开创了离散泛函分析方法,为研究非线性发展方程的差分方法开辟了新方向;石钟慈院士研究了非协调有限元收敛性的各种性质,建立了新的收敛判别法,证明了许多极有应用价值的非协调元的收敛性;林群院士及陈传淼、朱起定、吕涛等研究了有限元超收敛理论及高精度算法;应隆安提出了无限元方法;郭本瑜发展了谱方法;余德浩发展了自然边界元方法和自适应边界元方法;韩厚德研究了近似的人工边界条件法;周天孝、张关泉、袁益让、孙家昶等在航空工业、石油勘探、油藏模拟等领域的科学计算中取得了许多理论及应用成果,等等,这里不再一一详述。

此外,在从事科学计算研究的海外留学生中,近年也已涌现出一批非常优秀的年轻人才。他们在国内学习时打下了扎实的基础,又在国外深造多年,现已在国际上初具声望,如先后获得冯康科学计算奖的留美青年学者舒其望、许进超、侯一钊、鄂维南、金石等都已做出了杰出的工作。他们经常回国进行学术交流和合作研究,也促进了国内的学术发展和青年计算数学家的成长。

3 发展与展望

从简单到复杂、自低维至高维、由线性向非线性,以至实现“全物理、全系统、三维、高分辨、高逼真”的大规模、高性能的数值模拟,这是当前科学与工程计算的发展趋势。这样的计算要求全新的方法和理论。

大规模计算提出的世界性难题已形成科学计算的学科前沿。求解由实际问题得到的复杂的偏微分方程,不仅计算规模大,更由于非线性、多尺度、长时间、不适定、多区域、高病态等特点使计算格外困难,现有的算法远不能满足需求。这正是目前由国家科技部支持的国家重点基础研究发展规划(即“973”)项目“大规模科学计算研究”必须解决的关键科学问题。

“大规模科学计算研究”项目是多学科交叉的应用基础研究,将针对国家目标在环境、材料、能源等领域选择几个具有挑战性的大规模计算问题为主攻方向,应用科学计算这一研究手段,为高新技

术及前沿学科的发展提供必要的数据和新的研究途径。该项目重点研究解决这些重大问题所必需的高性能计算方法,并利用我国已有和将发展的大型计算机系统为测试和实现平台,解决几个有实际背景的大规模科学计算问题。项目设置了复杂流动的高精度数值模拟,物质性质机理的多尺度计算研究,油藏模拟与波动问题及其反问题计算,基础计算方法的创新与发展,大规模计算机软件系统的理论和实施等 5 个课题。前三个课题瞄准了环境、材料、能源领域的三个应用方向,开展目标明确的大规模科学计算研究。第四课题则针对计算数学发展的学科前沿,特别在以下几方面致力于基础计算方法的创新与发展:动力系统的几何算法;有限元边界元新型算法,特别是适合求解各类复杂的科学问题、适应并行计算等高性能计算需要的区域分解算法、多重网格算法、多尺度算法、自适应算法;偏微分方程的其它类型的计算方法;数值代数和数值逼近;以及新出现的某些非常规计算方法等。大规模模计算机软件系统的基础理论与实施及并行计算第五课题的研究内容。项目实施两年来上述这些课题的研究工作都已取得了重要的阶段性进展。

由于计算数学的发展与计算机及其它科学和工程技术的发展紧密相关,今后的计算数学研究工作还应尽可能兼备数学、物理学、工程科学和计算机科学的多方面的知识。要培养善于应用计算机进行数值实验和分析的计算数学人才,大力提倡进行跨部门、跨行业、广泛的国内外学术交流与合作,跨学科联合或交叉培养博士生与博士后研究人员,以加速科学和工程计算的发展,并促进计算数学的新的研究成果在更广泛的科学和工程领域中

得到应用。

计算作为第三种科学手段,已使人类科学研究方法更加完善并促使科学技术以前所未有的速度向前发展。计算正使科学技术更多更快地转化为生产力并对人类社会产生着不可估量的巨大影响。为把信息和数据变成知识,从而探索科学未知、促进技术创新、加强国防建设、保障国家安全,计算正起着不可替代的重要作用。

我国迫切需要加速发展计算数学和科学工程计算。与发达国家相比,我国在科学与工程计算领域总体上还很落后,国家对这一学科的投入更与发达国家无法相比。在国际科学技术和综合国力竞争异常激烈的形势下,大力发展我国的计算数学和科学工程计算研究已成为当务之急。由于已有一支曾取得过很多高水平研究成果并在国际上有重要影响的研究队伍,有独特的智力资源优势,我国在这一领域已具备加速发展的稳固扎实的基础。随着经济的持续快速发展,国家也完全有可能不断加大对科学和工程计算研究的支持与投入。相信国家的更大支持和投入必将使我国的计算数学和科学工程计算工作者为我国科技发展与综合国力的提高,及在世界上占有更重要的一席之地做出更大的贡献。

参考文献

- 1 石钟慈,桂文庄. 中国科学院院刊, 1990, (4): 292- 298.
- 2 余德浩. 中国基础科学, 2001, (1): 19- 25.
- 3 余德浩. 科学, 2001, 53(1): 49- 51.

A Review and Prospect for Research in Scientific and Engineering Computing

Yu Dehao

(Institute of Computational Mathematics and

Scientific Engineering Computation, CAS, 100080 Beijing)

Fast advances of information technology are making scientific computing as valuable as theory and experimentation as an important tool for scientific research. New problems and supercomputers

require fundamentally new methods and approaches to scientific computation. The main purpose of this paper is to review the developments of scientific and engineering computing in China in recent 50 years. Especially, the author emphasizes the great contributions made by Feng Kang and his school in these fields. The State Major Basic Research Project “Research for Scientific Computing on Large Scales” is also briefly presented here.

余德浩 计算数学与科学工程计算研究所研究员, 副所长, 博士生导师。1945 年 4 月生, 1967 年毕业于中国科学技术大学。1984 年获理学博士学位。1986 年获德国洪堡研究基金。1989 年获中国科学院自然科学奖一等奖。1991 年获国家教委及国务院学位委员会授予“做出突出贡献的中国博士学位获得者”荣誉称号, 1998 年获国家人事部授予“国家级有突出贡献的中青年专家”称号。迄今已发表论文 80 余篇, 出版中、英文专著各 1 本。

资料窗

中国自然科学基金委员会成立十五周年

1981 年中国科学院 89 位学部委员联名上书党中央和国务院, 建议设立面向全国的中国科学院学部科学基金, 以稳定支持基础研究。中央领导高度重视。此后, 中国科学院自然科学基金正式启动。

1984 年, 国务院科技领导小组所属基础研究和应用研究调查小组于 11 月 29 日向国务院科技领导小组建议, 尽快建立国家自然科学基金和相应成立“国家自然科学基金委员会”。1986 年 2 月 14 日, 国务院发出《关于成立国家自然科学基金委员会的通知》。1988 年 4 月 3 日, 经国务院批准, 国家自然科学基金委员会由暂挂靠中国科学院改为直属国务院。1988 年 6 月 7 日, 国务院决定, “国家自然科学基金委员会为副部级机构, 享受国务院直属局待遇, 不列入国务院序列, 由国家科委归口管理”。2000 年 12 月 27 日, 国务院发文恢复国家自然科学基金委员会的国务院直属事业单位的地位。