

# 有限元、自然边界元与辛几何算法<sup>\*</sup>

## ——冯康学派对计算数学发展的重要贡献

余德浩 (中国科学院数学与系统科学研究院计算数学研究所 北京 100080)

计算数学是当代数学科学的重要分支,是伴随着计算机的出现而迅速发展并获得广泛应用的新兴交叉学科,是数学及计算机实现其在高科技领域应用的必不可少的纽带和工具.计算与理论和实验相并列,已经成为当今世界科学活动的第三种手段,这是二十世纪后半叶最重要的科技进步之一.值此世界进入新的世纪,国际数学家大会将首次在我国召开之际,回顾半个世纪来我国计算数学的发展,尤其是以已故冯康院士(1920—1993)为代表的我国计算数学家群体,即“冯康学派”对国际计算数学发展所做出的重要贡献,是非常有意义的.当然由于篇幅所限,本文只能涉及部分研究领域和少数专家学者,挂一漏万在所难免.

冯康先生祖籍浙江绍兴,1920年9月9日出生于江苏南京,6岁迁居苏州.1939年毕业于省立苏州中学,1944年毕业于中央大学物理系.1945年起先后在复旦大学物理系、清华大学物理系和数学系任教.1951年转到刚组建的中国科学院数学研究所,不久便赴苏联斯捷克洛夫数学研究所工作.1953年回国.1957年调入中国科学院计算技术研究所.1978年任中国科学院计算中心主任.1980年当选中国科学院学部委员(院士).1987年起任计算中心名誉主任.曾任全国人大代表、全国计算数学会理事长、《计算数学》《数值计算与计算机应用》“J. Comp. Math.”“Chinese J. Numer. Math. Appl.”等四刊主编、国家攀登计划项目“大规模科学与工程计算的方法与理论”首席科学家等职.1993年8月17日冯康院士因后脑蛛网膜大面积出血不幸在北京病逝,享年73岁.

冯康院士的成就是多方面的.美国科学院院士 P. Lax 教授在获悉冯康院士去世的消息后,曾在美国 SIAM News 上发表悼念文章.他写道:冯康早年从事纯粹数学研究,“在 1950 年代后期转向应用数学,并在这一领域做出了他最重要的贡献.他并行于西方独立地开创了有限元方法的理论.他展示了如何有效地结合边界元和区域有限元.他提出并发展了求解 Hamilton 型演化方程的辛算法,指出对长时间计算它比标准方法优越得多.”这里, Lax 肯定了冯康在有限元、自然边界元和辛几何算法三方面的成就.本文也将从这三方面论述以冯康院士为代表的中国学者对计算数学发展做出的重要贡献.

### 1. 有限元方法

费尔茨奖获得者美国丘成桐教授对冯康院士的成就给予极高的评价.他在“中国数学发展之我见”(中国科学报,1998,3,11)一文及在此前后的多次演讲中都强调指出:“中国近代数学能超越西方或与之并驾齐驱的主要原因有三个,这主要是讲能够在数学历史上很出名的有三个:一个是陈省身在示性类方面的工作,一个是华罗庚在多复变函数方面的工作,一个是冯康在有限元计算方面的工作”.他又说:“我们要从数学的根本上来找研究方向,但近 20 年来基本上跟随外国的潮流,没有把基本的想法搞清楚,所以始终达不到当年陈先生、华先生和冯先生他们的工作成就.”

50 年代伴随着计算机的发展,科学计算在西方兴起.冯康先生敏锐地悟出科学发展进入了转

\* 收稿日期: 2001—09—17.

折时期, 计算科学将大有可为, 中国面临难得的机遇。1957年, 他遵照华罗庚先生的建议, 毅然放弃了精深的纯粹数学研究, 由中国科学院数学研究所调到正在筹建的计算技术研究所, 组建计算数学和科学计算的研究队伍。

当时我国的计算数学研究刚刚起步。1959年我国第一台大型电子计算机在中国科学院计算技术研究所研制成功。在该所三室工作的冯康带领他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。为了克服传统的差分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、黄鸿慈等人开展了椭圆型方程计算方法的系统研究。在大量计算实践的基础上, 冯康进行了系统的理论分析及总结提高, 通过把变分原理与剖分逼近有机结合, 把传统上对立而各具优点的差分法与能量法辩证统一, 扬长抑短, 推陈出新, 一举克服了上述两方面的困难, 于1964年独立于西方创立了数值求解偏微分方程的有限元方法, 形成了标准的算法形态, 编制了通用的计算程序, 并及时地解决了当时我国最大的刘家峡水坝的应力分析问题。

1965年冯康在《应用数学与计算数学》上发表了“基于变分原理的差分格式”一文, 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, 从而建立了有限元方法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。这篇论文的发表是我国学者独立于西方创始有限元方法的标志。

有限元方法是求解连续体偏微分方程的一种离散化方法。冯康将其要点归纳为“化整为零、截弯取直、以简驭繁、化难于易”。它的基础分两个方面: 一是变分原理, 二是剖分插值。从第一方面看, 它是传统的能量法的一种变形, 从第二方面看, 则是差分方法的一种变形。这是两类方法相结合取长补短而进一步发展的结果。它具有很广的适应性, 特别适合于几何、物理条件比较复杂的问题, 而且便于程序的标准化。由于该方法对有限与无限、连续与离散、局部与整体、简单与复杂、理论与实际、人与机器等各种矛盾的处理都比较得当, 因此在解题能力、处理效率和理论保证诸方面都远远超过传统的方法。在有限元方法创始之初, 冯康就认识到它的内在潜力, 并估计这一方法将使固体力学和其它一些领域中提出的椭圆型方程计算问题得到实际的解决, 这一点确实已被尔后几十年的实践所证实。

文革动乱迫使冯康中断了对有限元方法的研究工作。但即使在那段动乱时期, 他的研究小组仍应用有限元方法解决了国防建设和国民经济中数十个重大的计算课题, 并应有关单位要求, 作了多次学术讲演, 举办了多期学习班, 做了大量的推广应用工作。从1972年开始冯康的研究小组举办了数十次报告会, 听讲者多达数千人, 他们同时还承担了咨询服务、提供资料和计算程序等工作, 有力地推进了有限元方法的发展。今天, 几乎所有的工业部门和国防科研部门都在应用有限元方法, 有限元方法已经成为一项生产力, 为我国的现代化建设作出了贡献。

七十年代中后期, 在经典的连续有限元即协调元取得成功的基础上, 冯康注意到了间断有限元, 包括非协调有限元的理论还处在不甚令人满意的状态, 及时开展了相关研究。他建立了间断函数类的庞加莱(Poincare)型不等式, 间断有限元函数空间的嵌入定理, 及间断有限元的一般收敛性定理, 于1979年在《计算数学》发表了“论间断有限元的理论”。这些成果正是后来得到系统发展的非协调有限元理论研究的先导。

冯康还将椭圆方程的经典理论推广到具有不同维数的组合流形, 即由不同维数子流形组成的几何结构, 这在国际上为首创。他的论文“组合流形上的椭圆方程与组合弹性结构”(《计算数学》, 1979)为组合弹性结构提供了严密的数学基础, 解决了有限元方法对组合结构的收敛性。他曾将此项成果向工程界讲授, 颇受欢迎。国外直到八十年代中期才有这方面的工作。近年来, 由于诸如机器人及空间站等高度复杂的结构的出现, 这一方向已显示出极大的发展前景。

有限元方法的创立是计算数学发展的一个重要的里程碑。冯康独立于西方创始有限元方法,并先于西方建立了其严密的理论基础,对计算数学的发展做出了历史性的贡献。冯康创始有限元方法的学术观点和学术道路与西方迥然不同,这使得他能在比西方远为落后的计算机设备条件下做出领先于西方的工作。

有限元方法的创立对数学学科本身也有重要意义。它的出现使得微分方程的数值解法及其理论分析的面貌大为改观。有限元方法对于数学、力学、工程科学和计算机科学学科之间交流渗透起到了极大的促进作用。有限元的基本方法和理论已因其意义重大且已定型成熟而成为经典,已被写进教科书,并被多数理工科大学列为必修课程。

冯康对有限元方法的重大贡献今天已得到国内外公认和重视,冯康的论文被后来的多数国内同行反复引用,被视为有限元方法的创始工作。外国科学家在事过十余年了解到冯康的工作后也都一致对这一工作的历史地位和作用予以充分肯定,公正承认冯康院士在创始有限元方法中做出的贡献。法国科学院院士J.L. Lions教授在70年代末就已对此给出了很高的评价,他说:“有限元方法意义重大,中国学者在对外隔绝的环境下,独立创造了有限元方法,在国际上属最早之列,今天这一贡献已为全人类所共享。”

继冯康院士之后,石钟慈院士在有限元研究中也做出了非常杰出的贡献。1970年代末,石钟慈在多年与工程人员合作推广应用有限元方法的基础上,创造性地提出了样条有限元,将样条逼近与有限元巧妙结合,得到了完整的误差分析。此法曾在许多部门应用,解决了众多工程设计的实际问题,从1980年代开始,他转向非协调有限元研究,取得了一系列系统深入的重大成果。他否定了当时国际上流行的判别非协调元收敛性的 Irons 准则,揭示了工程直观和数学严密之间的矛盾;他首次证明非协调元的收敛性强烈依赖于网格剖分方式,并发现了一系列错向收敛现象;他提出了一种新的判别非协调元收敛性的准则,既可靠又方便,这是非协调元收敛性研究的一项重大进展,为实际应用提供了强有力的工具;他应西方有限元创始人德国的 Argyris 教授要求,证明了一种非标准元(TRUNC)的收敛性。近年他又从事非协调有限元多重网格技术研究,特别在瀑布型多重网格研究中取得了重要成果。

此外,还需要提及林群、陈传淼、朱起定与吕涛等人自1970年代后期起在有限元超收敛、后处理与高精度算法研究中做出的许多重要工作。他们被国外同行称为“中国超收敛学派”,并引起国际同行长期的关注和重视。

余德浩在有限元后验误差估计与自适应算法研究中也做出了有意义的工作,对二阶椭圆边值问题分别给出了任意奇次及偶次矩形元的渐近准确后验局部误差估计,并首先注意到二者的本质差别(1987),随后他还将后验误差估计与自适应计算的思想应用于边界元,首次建立了自适应边界元的数学理论,自1987年起发表的这些成果已在国际上引发一系列后继研究,近年仍被国外学者不断引用。

## 2. 自然边界元方法

自60年代以来,有限元方法对于求解有界区域椭圆边值问题取得了极大的成功,被广泛应用于工程技术和科学计算中。但是,许多实际计算问题涉及无界区域,而用有限元方法求解无界区域问题必然遇到本质性困难,为达到所需要的计算精度,往往要付出极大的代价。为克服这一困难,冯康教授从“微分方程边值问题可以有种种不同的数学形式,它们在理论上等价,但在实践中未必等效”这一基本观点出发,既深刻地总结出对有界区域问题“有限元方法成功的一个关键就是合理地选取了变分的数学型式”,又敏锐地感觉到对无界区域问题必须探索新的更适宜的数学型式并发展相应的数值计算方法。于是在七十年代后期至八十年代初期,冯康的研究兴趣转向了边界归化及边

界元方法这一领域。

关于对微分方程边值问题作边界归化的思想早在上一世纪就已出现,但应用于数值计算却是到本世纪 60 年代才开始的,这就是边界积分方程法。从 70 年代后期开始,这一方法又被称为边界元方法,并在国际上开始形成直接法与间接法两大流派。与国际上流行的这两类基于经典边界归化理论的方法完全不同,冯康根据微分方程边值问题的物理本质和数学特性,提出了正则边界归化的思想,开创了国际上边界元研究的新流派。他指出,唯有通过正则边界归化,才能保持能量不变,从而保持问题的本质不变。后来他又改称此类归化为自然边界归化。基于这一思想,他和他的学生余德浩系统地发展了自然边界元方法。这一方法除了具备所有边界元方法共有的将问题降维处理及适于处理无界区域问题的优点外,还有许多独特之处:由于自然边界归化保持能量不变,原边值问题的许多基本性质被保持;由于基于相同的变分原理,自然边界元能与经典有限元自然而直接地耦合;自然积分方程由原边值问题唯一确定,它正是此边值问题的解的互补的微分边值之间的本质的关系,也即狄里赫莱-诺依曼(Dirichlet-Neumann)映射。自然边界归化在各种边界归化中占有特殊的地位,而自然边界元方法则具有许多理论上和数值计算上的优点。

1978 年冯康应法国国家科学研究中心和意大利科学院邀请赴法,意讲学,在国际上首次提出了自然边界归化的思想,讲演的主要内容随后发表在 1980 年《计算数学》论微分与积分方程以及有限与无限元”一文中。1982 年他与法国科学院利翁斯(J. L. Lions)院士一起主持了“中法有限元讨论会”,又与余德浩联名发表了论文“椭圆边值问题的正则积分方程及其数值解”,这是该次会议的两个最主要的报告之一。1983 年冯康获得在国际数学家大会上作 45 分钟特邀报告的殊荣,报告的题目便是“有限元方法与自然边界归化”,在报告中,他介绍了他和余德浩关于自然边元及人工边界条件研究方面的最新成果。1984 年冯康应用自然边界归化于海伦霍兹(Helmholtz)方程,对其无穷远边界条件即索墨菲尔德(Sommerfeld)辐射条件在人工边界上给出了一系列近似的条件。1985 年韩厚德与余德浩几乎同时,以及稍晚些时候许多外国学者也分别把这一思想应用于其它椭圆边值问题,发表了一系列文章。

冯康院士的这些工作对边界归化理论做了重大发展,提出了新的边界归化方法,这一方法已成为当今国际上边界归化理论的三大流派之一。这些创造性的工作开辟了边界元研究的新领域,在国际上至今仍有重要影响。尤其随着 80 年代中期以来区域分解算法成为国际上科学工程计算的一个研究热点,自然边界归化理论也越来越引起国际同行的关注并已引发了一系列后继研究。自然边界归化与有限元相结合可以形成一个有限元与边界元兼容并蓄而自然耦合的整体性系统。这一方法能够灵活适应于大型复杂问题,便于分解计算。这正是当前与并行计算相关而兴起的区域分解算法的先驱工作。

余德浩自 1978 年起在冯康院士指导下系统地发展了自然边界归化理论和自然边界元方法,发表了一系列论文,他得到了典型区域上各类典型边值问题的自然积分方程,也即 Dirichlet-Neumann 映射的表达式,研究了其拟微分性质。为克服积分核超奇异性带来的困难,他提出了求解一类超奇异积分方程的积分核级数展开法,简单而有效地解决了自然边界元法的数值计算问题(1983),这是国际上研究超奇异积分方程数值求解的最早的工作之一。为克服自然归化对区域的限制,他提出了有限元与边界元的自然耦合法(1983)。这一方法近年被称为 D-N 方法或准确的人工边界条件法,作为处理无界区域问题的主要方法获得了广泛的应用。1993 年余德浩在科学出版社出版了专著《自然边界元方法的数学理论》,全面系统地总结了这些成果。日本著名数学家、日本数学会前会长藤田宏教授在给余德浩的信中曾指出:“您的书(指余德浩的专著《自然边界元方法的数学理论》)包括了涉及泛函分析和应用分析的重要课题的基本事实及最新成果,通过您的  $K$  算子

(指自然积分算子)也即我们的S算子将算子理论方法应用于边值问题,这是位势理论的现代版本,怀着对您的老师也是我的朋友冯康教授的思念之情,我再次表达我对你们学派的思想和方法的尊敬。”

冯康院士在临终前一年曾撰写了“自然边界归化与区域分解”一文的英文摘要。他在摘要中指出:“有许多不同的边界归化途径,最好的一种看来是自然边界归化。自然边界归化能直接用作区域分解及删除,也能间接地应用于预条件问题”。可惜他本人没有来得及实现这一想法。但正是在这一想法指导下,余德浩提出并发展了适于求解无界区域问题的基于自然边界归化的新的重叠型及不重叠型区域分解算法(1994, 1996),对收敛速度及松弛因子选取进行了精细分析。这是国际上研究无界区域分解算法的最早的工作之一。近年他又将自然边界归化理论及自然边界元方法推广到抛物型问题、三维椭圆问题,研究了椭圆人工边界,发展了相应的耦合算法及区域分解算法。

韩厚德自1985年起系统发展了无界区域问题的近似人工边界条件法。他研究了位势、平面弹性、Stokes、Signorini等问题,从人工边界上准确的边界条件即自然积分方程出发,导出了各种近似的人工边界条件,给出了简便、有效的算法。

应隆安、韩厚德等人提出的无限元方法也称无限相似单元法(1977),是求解无界区域问题及含奇点问题的另一种重要的数值方法。它也是有限元方法的发展与补充。在无限元方法中,求解区域被剖分为无限多个单元,从而导致无穷阶线性代数方程组,但当问题及剖分具有某种比例性质时,用分析技巧可将其归结为一个有限的方程组。这一方法也已得到了广泛的应用。

### 3. 动力系统的辛几何算法

在创始有限元方法的过程中,冯康院士深深体会到,同一物理过程的各种等价的数学表述可能导致不等效的计算方法,有限元对椭圆边值问题的成功是因为选择了适当的力学体系和数学形式。有限元不能很好地解决动态问题则是由于拉格朗日力学体系不能很好地反映其本质特征,唯有哈密尔顿(Hamilton)力学才是可供选择的研究动态问题的力学体系。于是在80年代初,冯康转向动力系统计算方法的研究,提出了哈密尔顿系统的辛几何算法,又开辟了一个有广阔应用前景的全新的研究领域。

当代科学计算的主要课题是数值求解各种数学物理方程。在数理方程的谱系中,列于首位的是经典的力学方程。这类方程有三种等价的数学形式体系,即牛顿、拉格朗日及哈密尔顿体系。虽然各种不同形式体系在表达同一物理规律时在数学上是等价的,但它们对研究及求解该问题却能提供不同的技术途径,从而在实践中并不等效。哈密尔顿体系以其形式上特有的对称性一直是物理学理论研究的出发点。一切守恒的真实的物理过程都可以表示为哈密尔顿体系,其数学基础则是辛几何。辛几何是现代物理学和力学的数学基础之一,与欧氏几何一样起着不可替代的重要作用。冯康以他特有的数学直觉抓住了设计哈密尔顿系统数值方法的突破口——辛几何方法。只有辛几何算法才是适合计算哈密尔顿系统的数值方法。1984年他在国际微分几何与微分方程北京讨论会上,提出了哈密尔顿系统的辛几何算法,并组织研究队伍进行系统深入的理论研究和数值实验,经过十余年坚持不懈的努力,取得了极其丰硕的成果。

哈密尔顿方程包括有限维或无限维的都是特定形式的常微分方程或偏微分方程。尽管哈密尔顿体系在现代物理学和力学研究中有重要地位,但直到八十年代以前,在介绍微分方程数值求解的众多方法的浩繁文献中,几乎所有的计算方法都是从牛顿体系或拉格朗日体系出发的,针对哈密尔顿体系的计算方法却是个空白。冯康注意到了这一极不正常的现象,从八十年代初期开始研究针对哈密尔顿体系的计算方法。1983年,国外出现了第一篇对特定哈密尔顿方程构造差分格式的文章。冯康则于1984年在国际微分几何与微分方程北京讨论会上作了题为“差分格式与辛几何”的大会

报告,首次系统地提出了哈密尔顿系统的辛几何算法,开创了将计算物理、计算力学和计算数学相结合的、富有活力及发展前途的这一前沿研究领域。随后他立即组织了一支精干的研究队伍对哈密尔顿系统的计算方法进行系统研究。

冯康的工作涉及以下内容:提出了基于辛几何的哈密尔顿算法及其完整的理论框架;发展了辛变换生成函数与哈密尔顿—雅可比方程的系统理论;给出了产生任意阶精度辛差格式的构造性方法;提出了由动力系统向量场决定相流形式幂级数的理论,应用该理论来研究算法定性定量性质,使动力系统及其数值方法在该理论框架下得到了统一;提出了保持动力系统结构的算法,包括保哈密尔顿体系结构的辛算法,无源系统的保体积算法,切触系统的切触算法,量子系统的酉算法,实现了动力系统算法的几何化;发展了一套利用组合格式达到高精度保结构的算法,即乘积外推方法;等等。

传统的算法除了少数例外,几乎都不是辛算法,它们都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非传统的算法却有保持体系结构的优点,在空间结构、对称性和守恒性方面优于传统算法,特别在稳定性与长期跟踪能力上具有独特的优越性。深入的理论分析和大量的数值实验令人信服地表明,辛算法提供了解决牛顿运动方程的正确途径,解决了久悬未决的动力学长期预测计算问题。目前这一成果已引发了国际上大量的后继研究,也正在促进天体物理学、分子动力学和流体力学等领域的计算革新,并将在更多领域有更为广泛的应用前景。

冯康在生前的最后十年一直坚持这一课题的研究。他始终工作在这一方向的最前沿。他及其的研究小组在这一方向共发表论文70多篇,并多次应邀出访及在重要的国际会议上作特邀报告。冯康开辟了一个理应受到重视但却长期被忽视的研究领域,取得了举世瞩目的研究成果。他的成果也产生了重大的国际影响,在美国、苏联、西班牙、瑞士、荷兰、意大利、日本等国以及我国引发了大量的后继工作,促进了国际上这一方向研究工作的迅速发展,被认为可能引起天文、气象及分子动力学等领域中科学计算的重大革新。1994年国际数学家大会上有关辛算法的45分钟报告,冯康被推荐为大会报告的候选人之一。1995年国际工业与应用数学大会也邀请他作大会报告。但非常不幸,冯康没有来得及作这些报告便去世了。

秦孟兆教授于1980年代初开始追随冯康院士研究辛几何算法。在冯康先生去世后,他继续研究各种保结构算法,并将计算对象从常微分方程转向更复杂的偏微分方程,近年特别在多辛算法研究中取得了一系列重要的研究成果。

除了在上述几个方向做出的开创性工作外,冯康院士还曾首先倡导在我国开展广义函数理论、组合弹性结构计算、孤立子等非线性问题计算的研究,以及数理方程反演问题的数值方法及其在地质地震勘探中的应用研究。他直接或间接培养的学生已遍及全国和世界各地,其中许多人已成为知名的学术带头人。他开创的“冯康学派”已享誉国际,影响广泛而深远。以他的名字命名的“冯康科学计算奖”已成为海内外华人青年计算科学家向往获得的崇高荣誉,迄今已有旅美青年学者舒其望、许进超、侯一钊、鄂维南和金石,及国内青年学者袁亚湘、陈汉夫(香港)、张平文、陈志明共九人先后获得了该项奖励。

美国著名数学家P.Lax院士曾写道:“冯康的声望是国际性的。我们记得他瘦小的身材,散发着活力的智慧的眼睛,以及充满灵感的脸孔。整个数学界及他众多的朋友都将深深怀念他”。冯康院士逝世已经八年了。他的业绩已留在中国乃至世界数学发展的历史上。他曾为之奋斗的科学计算事业正在蓬勃发展。他的思想和精神还在指导并将继续影响我国几代科学计算工作者,激励着他们继续完成他开创的事业。

在国际数学家大会即将在我国召开之际,作者谨以此文表达对恩师冯康教授的深切怀念。