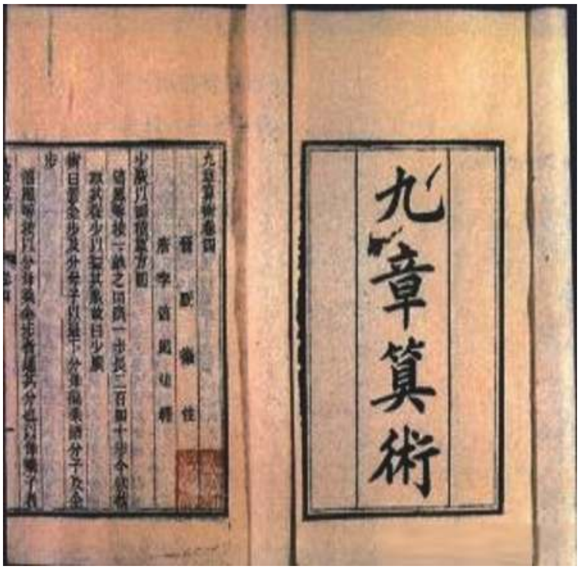
Scientific computing

科学计算的历史与展望

汤　涛

在数千年数学发展的历史长河中，东方和西方的先贤们不断努力，成就了今日数学的辉煌。古希腊人提出公理化体系、形式逻辑，使数学成为一门严密的、系统的、富有逻辑性的学科。柏拉图学园门口挂着“不懂几何者，不得入内。”当时的几何，是数学的精华所在。

在古代数学的研究中，还包括对“数”的追求，古希腊早期最杰出的代表人物是数学家毕达哥拉斯，他试图用“数”来解释一切，认定“世间万物皆数”。但其研究数学的目的并不在于使用，而是为了探索自然的奥秘。其后，作为古希腊数学辉煌时代代表人物之一的阿基米德，除了善于构造理论体系外，还有很强的计算能力。他的计算方法包含了微积分、极限等很多现代数学的基本思想。同时代的埃拉托色尼还通过计算给出了地球的直径，精确程度与人们今天所知相当接近。……在那个时代，“算”已经成为数学研究中很重要的一部分了。


九章算術

中国的数学研究有五千余年的历史，比西方早很多。其中，令我们中国人引以为豪的是流传至今的《九章算术》。它最晚成书于公元前 1 世纪，是古代中国人智慧的结晶，也是中国对于人类数学发展的一个伟大的贡献。书的内容

涵盖了比例、盈不足、开方、线性方程组解法等重要算法。此后的中国数学家大都是从《九章算术》开始学习和研究数学，许多人曾为它作过注释。其中最著名的有魏晋时期的数学家刘徽。

我国古代数学家还发明了最原始的计算器：算筹，它其实就是一根根比较整齐的小棍，材质多为竹、木，直径约两三毫米，长度十几厘米。用这些小棍，古人定义了自然数和分数的表示，加减乘除运算，以及开方、正负数等，算筹采用的是十进位制的记数方法。它出现的具体时间已不可考，但是早在我国春秋战国时期就已普遍使用了。

圆周率是圆的周长与直径的比值，是个无限不循环小数。我国古代数学家对圆周率的研究成果丰硕。东汉时期张衡算出圆周率约为 3.162，三国时期王蕃得到的结果约为 3.1556。魏晋时期的刘徽首创了“割圆术”，就是用圆内接正多边形的面积去无限逼近圆面积。他用“割圆术”作为求取圆周率的方法，将计算结果提高到了 3.1416。

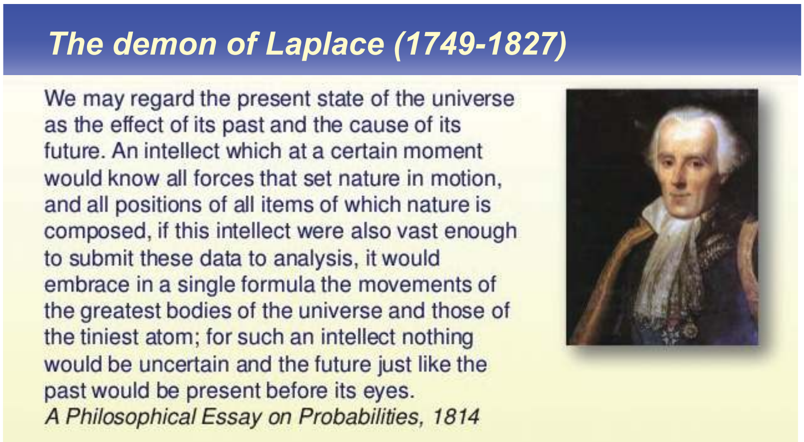
而南北朝时期的祖冲之更是站在前人的肩膀上，在没有计算机的帮助下，仅仅靠算筹来计算乘方和开方，硬生生地用割圆术算出了正 24576 边形的面积，把圆周率精确到了小数点后七位，比西方早了近一千年，实在是令人钦佩。我们在感叹古人智慧的同时，也为拥有这样的祖先而感到自豪。

在拥有电子计算机的今天，计算发生了天翻地覆的变化。不只是“算筹”这些计算工具的改进，像“割圆术”这类计算方法也被大大推进。特别是随着微积分这一强大工具的引入，计算方法告别了“冷兵器”时代，变得更加成熟且具有强大威力，并被人们应用到了解大自然、提高科学预测的活动中去。

中国历史上有很多“神机妙算”的故事，其中一个经典故事是《三国演义》中“诸葛亮于仲冬时节作法借三日三夜东南风”。以现代科学观点来看，这风是靠诸葛亮比较丰富的天文知识和经验“算”出来的，并不是“借”来的。自古至今，特别是近一两个世纪以来，人们一直在思索“如何预测天气”，还有“怎样在大海、沙漠里找到石油”等等问题。本质上这些问题的答案是科学预测，而追求答案的过程离不开数学的“神机妙算”。

在追寻世间万物演化机制这一问题中，法国数学家拉普拉斯做了很重要的思想指引。拉普拉斯被称为“法国的牛顿”，在微分方程、弹性力学以及概率论方面，都做出了奠基性的贡献。他在 1814 年出版的《概率论的哲学实验》一书中写到：“*我们可以把宇宙现在的状态看作是它历史的果，和未来的因。如果存在这么一个智者，他在某一时刻，能够获知驱动这个自然运动的所有的力，以及组成这个自然的所有物体的位置，并且这个智慧足够强大，可以把这些数据进行分析。那么，宇宙之中从最宏大的天体到最渺小的原子都将包含在一个运动方程之中；对这个智慧而言，未来将无一不确定，恰如历史一样，在它眼前一览无遗。*”

拉普拉斯这一描述揭示了，只要有能够刻画系统演化的方程，以及获得方程解的计算手段，人们就可以对很多看似不确定的现象进行可靠预测。



在源远流长的世界数学发展史中，“算”始终是很重要的一件事情。不过，在电子计算机出现以后，计算才真正迎来了飞速发展，才有了我们今天常说的“计算数学”。

1 计算机与计算数学

数学中最重要的一个“妙算”例子就是数值天气预报的实现。

我们所居住的地球，表面上空被厚度十几公里到二十多公里的大气层所环绕。我们每天所感受到的阴晴雨雪、冷暖干湿“天气”就发生在这里。大气环绕着地球每天都在运动变化，它遵循牛顿运动定律、质量守恒定律、大气状态方程、热力学定律、水汽守恒定律。数值天气预报，就是将描述大气的流体动力学纳维尔 - 斯托克斯方程组、热力学方程组，根据某一时刻观测到的大气状态，用数学方法求解，得到未来某一个时间的大气状态。

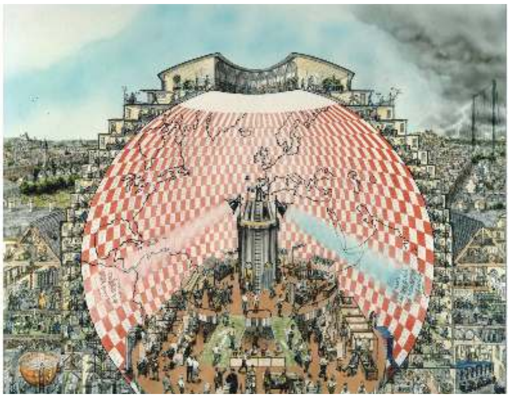
路易斯 • 理查德森（Lewis Richardson）是英国数学家、物理学家和气象学家，曾在英国国家物理实验室当过气象员。1916 年，他组织了大量的人力进行了第一次数值天气预报的尝试，即采用所谓的“隐式差分方法”离散描述天气变化的偏微分方程、通过手摇计算机求解得到的大型线性代数方程组，并利用代数方程组的近似解进行天气变化的图像显示。

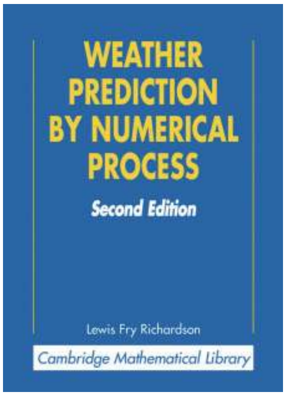
在他 1921 年由剑桥大学出版社出版的《用数值过程预测天气》一书中，理查德森详细描述了关于“天气预报工场”的奇思妙想：

“想象一个类似剧院的大厅，不同的是座位和看台围绕四周，占据了通常舞台所在的空间。大厅的前面上绘有世界地图。天花板代表北极地区，英格兰在看台上，热带地区在楼厅后座，澳大利亚在楼厅前座，南极洲则位于乐池。数量众多的计算员，分别计算着他们座位所在处的地图对应位置的天气，不过每个计算员只负责一个方程或者方程的一部分。一名较高级的官员负责协调一个区域的计算。大量的袖珍灯箱即时显示着计算结果，供附近的计算员读取。每个数字显示在灯箱上三个相邻的面，以便负责南北半球的人员保持沟通……

64000 个计算员在各自的座位上，对着球形墙壁挂起的世界地图，分别去计算自己座位所处地图对应位置的天气状态。”

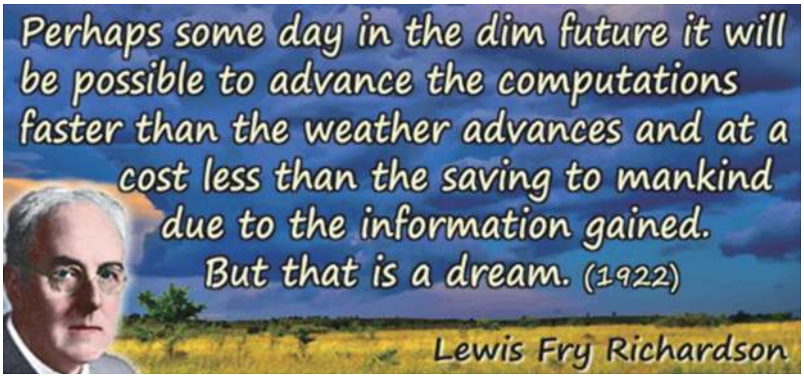
其中理查德森得到的结论是，用他设计的手摇计算机一人不停计算 6 万 4 千天，或者一个拥有 6 万 4 千人的计算工厂同时工作，就可以预报 24 小时天气。





路易斯•理查德森（1881–1953）设想的计算工厂和他的《用数值过程预测天气》专著

理查德森的设想在当时仅仅是一个美妙的梦幻，要知道那个时候世界上还没有电子计算机，更没有大范围联手合作进行全局天气预测的先例，六万多人的计算工厂显然是不现实的。但是他提出了一个超越时代的重要思想，即天气变化可以由偏微分方程确定，及用差分方法解方程可以得到近似解。至今人们还记得理查德森的梦想：“也许在不远的将来，我们有可能让计算速度比天气变化更快，……不过这只是梦想。”



随着计算机的出现，理查德森的梦想终于实现了。1954 年，英国 BBC 电台向全世界广播了历史上的第一次数值天气预报。1955 年，冯•诺依曼领导下的数值天气预报机构推动了美国多个电台在广播中使用数值天气预报。从此，理查德森的数值天气预报技术在全球正式启航。后来，超级计算机的出现和气象卫星数据的引入，使预报准确度和实时性不断获得改进，该技术一直被沿用至今。基于同类技术，我国在上世纪八十年代初首次在央视新闻联播节目中播

报天气预报。虽然起步较晚，但我国的天气预报技术发展速度较快，已逐步缩小与世界发达国家的差距。

这是现代计算数学的重要起步：它标志着数值求解微分方程可以预测天气！

我们知道，应用数学家建立了很多微分方程，来描述众多的自然现象，这叫做建立模型，包括弹性力学中的拉梅方程、电磁场问题麦克斯韦方程组、量子力学的薛定谔方程……

欧拉方程组可以理解为纳维尔 - 斯托克斯方程的简化形式。欧拉方程适用的地方很多，可以描述飞行中的流场变化，比如飞行器在空中速度过快（所谓的马赫数大于 1）的情况下，会使周围的压力、空气密度、温度等产生不连续分布，即产生了激波。这些都可以通过欧拉方程描述出来。

广义相对论是爱因斯坦在 1915 年提出来描述引力现象的几何理论，其基本观点是时空结构取决于物质的运动及分布。爱因斯坦提出的引力场方程，体现了运动的物质及其分布决定周围的时空性质，对于任意坐标变换，场方程的形式不变。求解爱因斯坦方程是人们了解宇宙运行规律的前提条件，但是爱因斯坦场方程是一个强非线性偏微分方程组，是自然科学中最复杂的偏微分方程之一。

虽然上述这些微分方程能够比较准确地描述人们想要知道的物理现象，但是这些微分方程都是“无穷维”的，使得这些方程的精确解成为了“海市蜃楼”，基本上无法得到。尽管当代计算机能力得到了突飞猛进的发展，但其利用“0”和“1”表达有限字长数字的本质决定了在找微分方程精确解这一问题上，无论多强的计算机也往往无能为力。

既然这般，我们可以退而求其次，即找到一个相对误差不超过百分之几的近似解，画出一个合理的图像来，做到眼见为实。计算数学要做的事，就是想办法找到高质量的“近似解”，帮助人们对精确解做到“眼见为实”。具体地说，计算数学家们为偏微分方程设计一套算法，并利用程序语言把算法装进计算机里，这样工程师们就可以通过简单地输入一些参数来解决掉那些可怕的偏微分方程。更好的是，计算数学家还力求能够在理论上证明，由计算机得到的近似解与精确解之间的误差不会超过工程师们心中的底线，让他们对这样的近似解心服口服。

如果工程师们比较贪心，希望能够拿到更好的近似解，该怎么办？这时理论分析的威力就发挥出来了。通过对算法做一类叫做收敛性的理论分析，计算数学家能够发现近似解的质量往往正相关于一些算法中的参数，如网格尺寸等。只要我们多用一些网格，就能够预期更精确、更好的近似解，只是需要花费更多的计算时间。这些就是计算数学需要做的事情。

那么，计算数学家具体有哪些绝活呢？关键步骤之一：微分方程的数值离散。通过将连续的微分方程“离散化”，将无穷维的微分方程变成有限多个线性或非线性方程组。100 年前，在《用数值过程预测天气》一书中，理查德森使用的差分方法，就是一种偏微分方程离散方法。那么差分方法是什么呢？

如上图中的拉普拉斯方程，在空间中任何一个点，我们可以做泰勒展开，这是