

谈谈计算力学的发展

武际可

(北京大学力学系)

提要 本文综述了计算力学的当前发展概况并简要介绍了当前应当注意的若干研究方向。

关键词 计算力学, 计算力学软件, 算法

1. 计算机的发明和计算力学的产生

在人类历史上,计算机的出现是一个划时代的事件。如果说,以前的各种发明的结果是延长了人们的手、眼、耳等器官的功能,那末计算机的发明可以说延长了人的脑的功能。所以人们又通俗地称计算机为“电脑”。

历史学家们经常用人类历史上的重要发明来标志一个历史时代。例如青铜器时代、蒸汽机时代、电气化时代等。我们同样也可以将电子计算机发明以后的时代称之为计算机时代,或者有的人称之为信息时代。因为这些发明的出现在相当广的范围内改变了人们的生活方式。电子计算机的发明,对于人类社会的各个领域也将产生难以估量的影响,对于科学技术和各门学科已经并继续产生着深刻的影响。

从计算机诞生起,各行各业的专家们都在预测计算机对人类社会可能带来的影响。有的说计算机将取代电话接线员、道叉工、描图员,乃至交通指挥警察的工作;有的说计算机将取代电影院、报纸;还有的说计算机将取代语言翻译、书籍和课堂教学的功能。这些预测有的已变为现实,有的还在争议。但不管怎样,它表明计算机对人类社会生活影响的深度。

计算机对自然科学和工程技术的结合是从它的诞生便开始的。但是发展得最早最广泛和最早系统化起来的方向便是计算力学学科的产生。计算力学做为一个学科是七十年代初叫出来的。它的定义是:用计算机解决力学问题。它是电子计算机大规模用于求解力学问题的产物。二十年来,情况发生了巨大的变化。它的重要性已经无需怀疑。就拿工程设计中一类十分普遍的力学课题——应力分析来说,如果五十年代百分之九十是借助于实验方法来解决,百分之十借助于计算的话;现在恰好反过来,百分之九十借助于计算而百分之十借助于实验。在五十年代教科书上讨论力学和物理中的研究方法时,归结为两个手段,即理论方法和实验方法,而现在则添加了第三种独立的方法,即计算机方法。

计算力学所研究的内容是十分广泛的,但概括起来,它主要解决三方面的问题:

第一、离散化方法问题 客观力学量都是空间和时间的连续量,为了能被计算机处理,必须变为离散量,即把描述力学过程的微分方程化为代数方程组。这方面,五十年代出现的,随后被广泛应用的有限单元法是离散化最优秀的例子之一。

第二、算法 对于同一个力学问题,有不同的算法。采用好的算法不仅省时、省存贮,问题算得大而且还准确。一个好的算法的产生和推广往往使解题效率成倍的增长。例如稀疏矩阵的消去法、波前算法,QR方法以及超矩阵算法和对非线性问题的同伦算法等都是适用于计算机的

行之有效的算法。

第三、软件 即程序编制工作。从六十年代开始,人们逐渐开发用于求解力学问题的通用程序。从事这种工作的人很多,形成了一个重要的方向。它包括有限元分析软件以及前后处理,图形显示以及各种人机对话式的计算机辅助设计软件等。

计算力学的这些研究内容说明它是三个学科杂交的产物。即:计算机科学、数学和力学。计算机仍在不断发展,新一代计算机的产生,新的通用软件的产生,必将为计算力学发展的新飞跃准备好物质基础。力学领域的新的的发展,必将导致随之而来的数值方法的产生,新的力学模型的建立,立即要求得到数值结果。而计算软件、离散化技术和高效算法的发展则和应用数学、计算数学乃至纯粹数学有着不可分割的联系。所以从事于计算力学的工作者必须密切注意这三个领域的最新动态,把三者结合起来。而计算力学的课题同时也是这三个领域的研究人员的重要内容。

2. 计算力学当前发展的特点

计算力学产生以来,它的发展速度是惊人的。目前它的面貌大致可以归纳为如下几个特点:

第一、线性问题趋于成熟 这并不等于说线性问题已经完全没有问题了,而是说它已经从理论阶段转化为工程应用阶段了。这方面的主要标志是:

1. 有限元法、杂交元法和众多的加权余量法和离散化方法的收敛性得到了证明,即这些方法的理论基础已经建立和相当完善了。

2. 单元系统和各种互相匹配的单元库已经配备得相当完善了。

3. 商用程序的大量出现。据瑞典一家数据公司不完全统计,世界上有限元文献已超过 25000 篇,程序达 1500 个。在美国供商用的有限元程序有数百种之多^[4]。国内包括引进和自行开发的也有十余种。

第二、大范围非线性计算力学问题成为当前的主攻方向 什么是大范围计算力学问题呢?非线性力学问题的研究可以追溯到十八世纪,例如早在 1744 年 Euler 求解弹性线就是非线性力学问题。但现在做为计算力学的非线性问题处理是很不同的。早先是针对不同问题采用不同的特殊技巧来处理,而现在则要求用数值方法能成批地处理非线性问题。

从六十年代起,非线性计算力学就已受到各方面的重视。所谓大范围非线性是指在处理非线性力学问题时在如下三个方面达到了新的高度: 1) 强非线性,即这种非线性不是对线性问题的微小偏离而是带有全局性的偏离。这时传统的处理非线性问题方法(小参数法)就显得不够了。因为线性问题解不能看为实际问题的很好的近似。例如有屈服材料的力学行为,强冲击问题等。2) 问题离散化后自由度很多,至少几十乃至数千和数万未知量的规模。3) 具有各种因素的耦合问题,包括应力、应变、温度、速度、加速度等。有的还有其他场与流场、电磁场和固体的耦合作用的问题。

大范围非线性计算力学的发展主要是和工程技术和国民经济中许多紧迫的新课题联系在一起的。这些问题主要是: 金属或非金属的压力成型问题、穿甲问题、核工程安全壳问题、岩体滑坡问题、交通工具的碰撞问题、大地构造和工程地质问题、地下核爆炸问题、接触问题、断裂问题、强非线性波动问题、海洋平台问题、生物力学问题、精密仪表中的柔韧弹性元件问题、各种反问题等等。

然而大范围非线性计算力学的意义还不仅限于力学领域。一部自然科学史说明,自然科学各个领域的精确化总是首先对力学现象的精确化开始,然后再将它的方法推广到其他领域。牛顿力学的研究对其后各种粒子、光学、统计力学等有着重要影响。计算机应用于自然科学也首先是在

力学领域得到充分的发育然后它的方法逐渐应用于物理、化学、生物等其他领域。从数值计算的角度看,非线性连续物理和非线性弹性的区别仅仅是次要的。各种力学场和物理场都可以在统一的框架下得到解决。可以预见非线性计算力学的研究不仅对力学对国民经济有重大意义而且对整个自然科学本身也将产生深远的影响。

计算力学近年来在非线性计算方面取得了重大的进展,各种新杂志、新专著和成果不断出现,有关的会议不断召开。它解题的能力不断提高。例如可以计算金属板料轧制过程的变形和温度场、可以计算锥壳受斜冲击下的大变形并和实际模型符合得相当好^[11]、可以计算汽车的全过程、可以计算整个汽车的碰撞的全过程、可以计算圆管纯弯曲下大变形直至上下表面接触的全过程^[12]等。这些例子说明近年来取得的成果是可喜的。

第三、大型软件的发展与完善 计算力学软件的通用性,是计算力学软件发展的一个突出特点。以有限元程序为例,最早是就事论事地一个问题编一个程序,到了六十年代初就进了一大步,一个程序能解算一类力学问题,如平面弹性问题、板、壳问题等。再后来,一个学科的大部分问题用一个程序就可以求解了,如线性弹性结构通用程序。SAP5 就是这样的程序。最后近十年来,若干学科的问题可以由一个程序来求解,如 ADINA,它可以计算弹性、粘塑性、也可以分析温度场、电磁场和渗流等。

当然专用程序也在发展,如旋转壳程序等。不过专用程序在发展中也适当考虑通用性。

当前通用程序的规模是相当大的,中等规模的也有几万条语句,大规模的有数十万条乃至上百万条。不仅如此,为了改善用户使用条件,近年来又着重在改善输入输出上下功夫。即输入输出图形化,有时还用人机对话或自适应人工智能等技术来减轻人的劳动。

更值得一提的是,近年来所谓符号系统软件的开发,它使计算力学产生了新的内容。以往认为计算机对解决力学问题只不过是在数值计算方面发挥作用。而符号系统的发展使计算机不仅可以用于数值计算还可以帮助推公式。现在一些非常重要的和复杂的单元模式、多刚体系统方程组的建立等公式推导量非常之大为人力所不能胜任,符号系统在这方面已取得相当的应用。另外国内科学院数学研究所研究了编制有限元程序的软件系统,这在有限单元软件发展中无疑是很重要的步骤。

在应用软件中应当提到的一个趋势是微型处理机和小型机上的程序广泛使用。微处理机的广泛应用是七十年代末期的事,它体积小、使用和维护方便。这使得中小型设计所、大专院校乐于使用,从而使计算力学更便于普及。相应于微型机的普及,适应它的计算力学软件也得到发展。或者专门针对微机来编制,如 SAP84,或者将大型机上的程序移植到微型机上,如 SAP5P。在 1988 年我们将大型机上的通用程序 ADINA 完整地移植到微型机上称为 MADINA,并开始为用户服务初步解决了一批工程技术问题。

我国在通用程序的研制上是相当落后的。迄今为止,在国内真正站住脚的自编程序为数很少,在国际上更谈不上。原因是多方面的。一方面是通用程序系统需要花大量的人力物力,一个中等大小的通用程序系统大约需高水平的科技工作者四五个人年的工作量,大型的通用软件则需要数十乃至数百人年,很少有单位能集中这么多的人力物力,当然其中还有组织管理上的因素。另一方面,由于知识分子工资低,软件定价相当便宜,所以软件收益无法维持它的投入,对于广大科技人员更没有吸引力。这说明,发展力学软件除了需要力学同行的重视外还需要相应的扶植政策。

第四、格子自动机和有限元机研制和探索 前面所说的几个情况都是限于用计算机现成的工具来求解力学问题方面。但是计算机的出现促使人们从根本方法论上来反省过去走过的路。从而对计算机和整个连续物理构思新的解决的途径。计算机把描述连续体的物理场方程离散化以

后来求解,这使人们想到自然界的事物本来就具有不连续性或离散性。把不连续的事物运用连续性的模型得到了微分方程后再离散化,这在方法论上是绕了一个很大的弯子。于是人们设想用本来就是不连续的模型去描述客观对象并直接进行计算。1985年,格子气(lattice gas)在流体力学方面的成功有望成为揭示连续物理的新手段^[9]。这种想法不仅有方法论的意义,而且对于计算机硬件设计也带来崭新的思路。以往的计算机都是由一个进行复杂运算功能的计算器来实现。如果把连续体理解为大量的点,每一点与别的点进行简单的动量交换。设想每一点一个运算器,它计算与别的点动量交换计数。物体上有多少点就提供多少个这种简单的计数器。基于这种想法已经设计和制造了格子气机。在美国早在八十年代初,就设计和制造了所谓有限单元机,每一个单元就是一个小的计算器,有多少单元就像搭积木一样用一大批这种计算器来实现迭代、坐标荷载等一系列的单独运算并和相邻单元交换讯息。

这种对连续物理的彻底离散化的思路导致了从方法论、计算机软硬件、以及力学模型化方面的新变革。当然它现在还处于初步发展的阶段。这种途径和神经生理、视觉和人脑的功能模拟的某些方面有着共同的认识。原来脑细胞的某些功能和现在的格子点计算机的一个格子点有某种类似。所以一定意义上说,计算力学在方法论上的新观点和当前关于思维基理的研究体现了某种同步和相互作用。有关这方面的前景还很难做出预测。

3. 计算力学当前若干热门课题

现时,计算力学涉及的面十分广,要想在一篇短文中列举这些方向是不可能的。这里只想列出其中最为突出的几个方向。前面说过,大范围非线性计算力学已成为当前计算力学的主攻方向,下面列举的这些方向都或多或少的具有非线性性质。

第一、分叉现象的数值计算 分叉现象是强非线性问题的本质特点。分叉问题目前受到力学界、应用数学界以及物理界的重视。近年来专门讨论分叉问题的国际会议、文集、专著不断出现。它反映了各方面的需要。这些提出分叉问题的方面是:工程结构的分叉失稳以及屈曲后行为的研究、流体流动的稳定性问题、热力学中的相变与临界现象、生态问题和经济模型中的分叉现象等。

分叉问题早期的研究多数采用小参数方法和求特征值的方法。目前则采用数值方法,任务是求分叉点的位置和确定分叉方向并沿分叉方向对分叉后的各支进行追踪,同时判定各支的稳定性。

分叉点在实际问题中非常重要,它对应于临界点、转折点、相变点等。分叉点的计算困难在于由于计算中的误差使得解分支不再通过分叉点而搜索失败。

分叉后各分支追踪的关键是第一步,即分支初始向量的获得。它的困难在于当处于分叉点时,控制方程的梯度矩阵是退化的,因而需要求控制方程组的高阶导数。但对实际问题梯度矩阵的存储量已相当可观,它相当于通常有限元离散化中的刚度矩阵,高阶导数的存储量和计算量就更大了。所以原则上说,当系统的自由度很少时,求分叉方向没有困难,对于自由度大的系统是相当困难的。

迄今为止虽然已经有一些计算方案求解分叉问题^{[4],[9]},但还不能认为问题已经解决。特别在大范围非线性分析中没有解决。所以目前大型非线性分析的程序中一般还没有这种功能。

第二、有效的算法问题 对于任何一个实际的数学问题都存在研究和选择较好的算法问题。而对于非线性计算力学问题,算法的作用尤其重要。这是因为在非线力学问题中计算方面遇到了新的难点:(1)计算量大,有时一个线性问题几分钟就算完,但同一规模的非线性问题花的时

摘要几倍甚至几十倍,得要几小时或几十小时乃至几天的时间。(2)奇性问题,非线性问题必然遇到的解的不唯一性、奇性常常使计算不能继续下去而停机。于是构造合理的有效的算法常常是一个或一类非线性问题能不能在计算机上求解的关键。

例如,近年来兴起的伪弧长算法有效地克服了解曲线的极值失稳所带来的计算机溢出。人们为克服这个问题曾经费了十年以上的努力,想出了许多凑合的方法,但都未能彻底解决问题。高维空间的弧长概念的引进彻底解决了这一问题。北大力学系从1980年起就独立采用这一算法并成功地用于若干专用的非线性分析程序^{[6],[7]}。

针对非线性问题,目前国际上所注目的新算法有:多正则法、并行算法、压缩算法(Reduction method)、延拓算法、以及有关分叉问题的各种算法。

第三、本构关系的研究 从原则上说,一个力学问题只要把方程提清楚了,又有了适当的离散化手段,再有了合理的算法,便可以在计算机上求解了。

目前,力学方程提法上,强非线性问题的几何描述和平衡条件方面应当说已经较好地解决了,相应的离散化方法和算法也已有了充分的准备。但迄今为止在大应变条件下的本构关系却还存在相当的困难。

所谓本构理论,从广义的角度来说包括应变梯度和应力张量的关系,也包括裂纹扩展准则问题。它的困难在于,一方面它和材料有关,还没有一个可以适用于各种材料的理论框架,另一方面和加载方式有关和温度等其他物理量也有关,高速度和低速度加载结果就很不相同。

按照传统观点想来,似乎本构关系问题只能靠理论方法和实验方法去解决。计算力学是无能为力的:即计算力学只能去解决那些物理模型已经提清楚的力学问题。事实上,这个观点已经在逐步改变着。研究本构关系的最大困难还在于实验的困难,理论的构想是相对容易的,但最终需要实验来验证。连续体本构关系是对微团来说的,要观察大应变下微团的行为就不是简单的事了,或者严格说几乎是不可能的。在这样的情况下,计算力学就可以挤身进去建立理论与实验的桥梁。计算力学根据一定的理论模型进行数值计算得到整体可观察的物理量,然后再和实验观察到的整体物理量去对照以验证理论的正确性。

在1983年,美国西北大学举行了一次专门性的学术讨论会,题为“非线性材料行为的大规模计算理论基础”。这次会议受到美国两个基金委员会的资助,即NSF和DARPA(National Science Foundation和The Defence Research Project Agency)这说明他们对这一研究方向的重视^[12]。

国内关于这一研究方向的研究也有不少单位在进行。但把研究成果与相当规模的通用程序结合起来的成果还不多。北京大学力学系从1980年开始经过七年研究开发的非线性程序NOLM中包括了一个相当规模的本构库^[8]。经过许多工程单位使用,效果较好。特别有关岩石土壤的本构关系部分,已为国外文献引用。

第四、反问题的计算 做为计算力学的反问题是近年来兴起的一个重要方向。

传统的力学问题大部分是正问题,即给了力学系统的几何形状、质量分布和外力条件来求力学系统的位移、速度、加速度、应力、应变、频率振型等物理量。反问题则是给了后者反过来求力学系统中的某些参量。

历史上最著名的反问题大概应当说牛顿万有引力的提出了。他根据开普勒关于行星运动的三定律反过来求出了这些行星受的力,从而建立了行星运动的微分方程。在材料力学中等强度梁和等强度结构的计算也应当算做一类简单的反问题,即已知结构每一剖面上受均匀的应力,把这个结构的剖面几何形状反解出来。

近代科学技术的发展要解决各种各样的反问题。这些反问题大部分具有很重要的工程技术背景。例如：已知地表附近的重力场，求地表下的密度分布，这是物理探矿的基本课题。在地表 A 点制造人工地震（例如放炮），在 B 点接收地震波，要从接收到的一系列波，反推地表下的密度分布，这也是物理探矿的另一个基本课题。结构的优化设计也可以看为一类特殊的反问题，它要求结构承受某种特定荷载下寻求结构物的最优几何形状或最优材料分布。另外，控制论中的最优控制问题、参数识别问题，在医学中的 CT (Computer Tomography) 也都是反问题。所以反问题不仅受到力学界的重视还受到数学、物理等学科和整个工程技术界的重视。

从数学的角度看，正问题的提法是给了问题的方程（方程的系数、右端项）、边条件、初条件、方程定义的区域边界。所以反问题大致可以根据给定解求问题的方程系数、右端项、边条件、初条件或边界形状等不同类型的反问题。不管怎样，反问题总是和正问题不同的问题，它们有着特殊的困难。困难在于：(1) 反问题都是非线性的；(2) 反问题大多是不适定的，即解的唯一性不能得到保证，而且对所提的条件是不稳定的。所以反问题算法的研究大部分归于不适定问题的求解。

由于这些困难，求解反问题需要发展特殊的算法。其中吉洪诺夫 (Тихонов) 正规化算法^[1]是一种行之有效的算法。反问题的研究需要用到较多的数学工具，这里就不详细介绍了。

总的说来，计算力学近年来在我国有了充分的发展，有限元法在工程技术部门得到了普及而且产生了相当可观的经济效益。但是绝大多数研究工作还停留在线性问题上，并且软件工作相对薄弱。究其原因有多方面的，最重要的原因是人才培养方面。首先，我国的工程技术人员培训中多数停留在线性问题上，只有一少部分研究生对非线性问题有全面了解，这不仅对开发研究带来困难，对应用和推广非线性研究成果也带来困难。其次，在培养人才方面分工过细，计算力学要求人才既懂力学又懂数学和计算机科学，这种综合性人才过少也是非线性计算力学起步较慢的原因之一。

总之，计算力学的发展，不仅关系到当前经济建设和高技术研究，而且也关系到将来发展和整个自然科学发展的需要。它是一个关系国家科技总体水平举足轻重的方向。我们希望力学界、力学教育界和国家基金部门以及科技行政管理部门能给以应有的重视。

本文发表前曾于 1988 年 6 月在太原市召开的北方七省市力学学术会议上宣读过，过后又做了少量修改和补充。

参 考 文 献

- [1] 季昀, 电子计算机和科学技术的发展, 数学的认识与实践, 3(1977).
- [2] 季昀, 电子计算机和计算数学, 数学的认识与实践, 4(1977).
- [3] 朱照宣, 点格自动机, 力学与实践, 2(1987).
- [4] 武际可、滕宁钧、袁勇, 分叉现象及其计算方法, 力学与实践, 4(1987).
- [5] H. B. Keller, Lectures on Numerical Methods in Bifurcation Problems, Springer-verlag (1987).
- [6] 苏先德、武际可、胡海昌, 旋转壳的大位移分析, 《中国科学》A 辑, 4(1987).
- [7] 苏先德、王颖坚、武际可、胡海昌, 含参数的非线性方程组的数值解法, 计算结构力学及其应用, 3(1988).
- [8] 殷有泉、张宏, NOLM 程序的理论文本及用户手册. 北京大学力学系固体力学教研室(1986).
- [9] Тихонов, А. Н., Арсенин, В. Я, Методы Решения Некорректных Задач, Издательство «НАУКА», МОСКВА (1974).
- [10] Jike Wu and Phillip L. Gould, Bending of Thin-Walled Beams, ASCE. Engineering Mech., 14 (1987).
- [11] Computational Methods in Structural and Solid Mechanics, Pergamon Press (1981).
- [12] Theoretical Foundation for Large-Scale Computations of Nonlinear Material Behavior. Nijhoff (1984).