

多物理场与数学(1)--求解器开发的数学基础

原创 邓子平 [多物理场仿真技术](#)



求解器是工业仿真软件里的核心，更强调了对数学的依赖。本文简要介绍一下求解器开发的数学基础。

关于求解器 (Solver)

因为字面意思太通用，不同行业对“求解器”的理解可能不同。

对于工业仿真软件，“[求解器](#)” (Solver) 主要指使用数值计算方法求解工程问题的计算程序，也是行业内的通用叫法，

工业仿真软件一般分为三个大模块：

[前处理器](#)，[求解器](#)，[后处理器](#)。

- 1.前处理器主要处理几何，设置业务数据以及求解器需要的网格和属性数据；
- 2.求解器则读取前处理的数据进行仿真计算，并导出结果；
- 3.后处理器则对求解器的计算结果进行加工，显示相应计算结果。

为了解耦软件，也为了便于测试和发布，求解器通常设计成作为独立的可执行程序，用文件的形式和前处理器和后处理器交互。这种结构从三四十年前软件设计之初一直沿用到现在。

根据笔者的研发经历，将研发相关知识分为四类，也包括求解器：

[第一类是理论基础](#)。比如各种数值理论，控制方程，数学公式等等，这类知识其实不需要过于深究，原因在于就类知识类似于万有引力理论，它反映了万事万物的一些规律特征，其实很难理解，记住就好。这一块知识是科学家，数学家的工作。

第二类是推导计算。在第一类知识的基础上，通过公式推导，理论验证，将其变成可编程实现的算法和代码。这块理论相对成熟，研发都有迹可循；但需要一定的技术积累，有相当的技术门槛，在某些前沿领域还是有不确定的因素，查阅论文，期刊是常有的事，对应于软件研发中的原型开发技术，[CAE软件研发的一些思考\(5\)--系统的开发求解器](#)一文中有过介绍。这一块需要对业务有相当的知识积累，也是对数学和业务依赖最多的部分。

第三类是工程应用。工程应用是在第二类知识的基础上的拓展，这类知识就要求在研发中着重需要解决实际工程问题。实际工程问题的特点是模型规模大复杂，各种参数偏离标准模型假设，特征高度非线性，有各种不合理设计，存在性价比的问题，系统工程特征突出。这类知识通常都是现成的技术方案，但是内容多，知识繁杂，交错各种非技术因素，要找到一个适合业务的技术方案也不是简单的事情。

第四类是软件开发。这个包括了基本的语言开发，需求分析，架构设计，流程管理，技术选型，系统集成等一系列和软件工程相关的知识。通常做求解器开发的朋友接触较少。但这块对于一款**软件产品**却又至关重要。

回到主题，求解器开发首先是理解

偏微分方程

偏微分方程是多物理场仿真技术的起点和理论基础。偏微分方程在不同行业又叫控制方程或本构方程，笔者一般叫“控制方程”。

从经典的热传导方程，波动方程，赫姆霍兹方程，再到拉普拉斯，泊松方程，以及纳维斯托克方程，麦克斯韦方程，以及薛定谔方程。几乎每一个方程都是一种物理场或者某一类行业里的控制方程。这些经典的偏微分方程可能相互有联系，比如[拉普拉斯](#)和[泊松方程](#)差别在于一个源项，[赫姆霍兹方程](#)是[麦克斯韦方程](#)的一种特殊形式，在这些基础方程上，通过简化，扩展又会衍生成出各种特殊的方程。

正如前面介绍的知识类型，偏微分方程理论属于第一类理论基础，对于研发来说，可能并不需要我们研究的太深，但是理解偏微分方程的特点却能很好的帮助求解器开发：目前大部分偏微分方程都为二阶，即最高偏导两次，在构造形函数时，二阶多项式性价比往往最好；在多物理场耦合仿真中，往往首先需要明确不同物理场构成的**偏微分方程组**，偏微分方程组的强耦合求解仍然是世界难题，实际工程中一般使用弱耦合求解。COMSOL软件是目前对偏微分方程求解支持比较好的工具，可以支持用户自定义的偏微分方程和方程组，抛开工业应用和精度不谈，是名副其实的多物理场仿真软件。

边界条件是求解偏微分方程的一个重要内容，也是求解器开发实现的重点，偏微分方程的边界条件在 [一篇文章入门多物理场有限元（全篇）](#) 一文中有所介绍。

偏微分方程求解的主流数值方法包括有限元，有限差分，有限体积，离散元，边界元，矩量法等方法，以及无网格法，显式方法，时域有限差分，谱方法等等。这些公众号之前有过介绍。

[一篇文章入门无网格方法\(1\)](#)

[一篇文章入门时域有限差分方法 \(FDTD\)](#)

[一篇文章入门边界元方法](#)

[离散元方法 \(DEM\) 简介](#)

三维几何

求解器中一般会涉及到三维网格的各种计算，需要一定的几何基础知识。比如矢量运算，基本二维三维网格特征计算，空间查找，遍历，树结构加速等。

数值分析计算

求解器中会涉及到微积分，插值，拟合，常微分方程，迭代方法，误差分析，高精度计算等等。其中微积分是高数的基础内容，也是偏微分方程推导的基本工具，研发可能不需要推导公式，但一定要能看懂微分积分公式，是基础性内容。

线性代数

线性代数介绍了线性空间的基本概念，向量操作，矩阵的基本特征和运算等。这门课程在大学里绝对是排名第一的“挂科杀手”，[但却是求解器开发基础中的基础](#)。

矩阵论

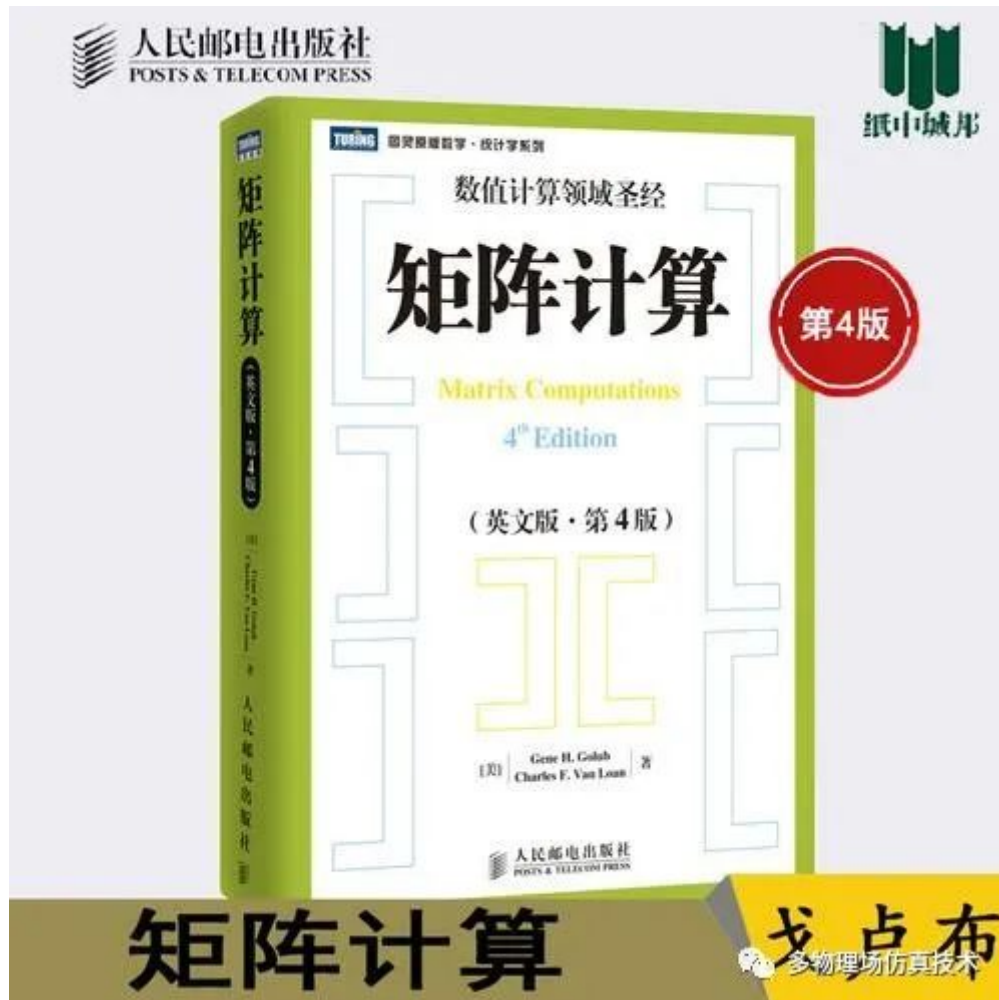
求解器的大部分操作都基于[矩阵](#)，而且是大规模矩阵，所以对矩阵基础知识和计算要非常熟悉。比如一般有限元方法都是稀疏矩阵，稀疏矩阵有其特有的压缩存储方式和数据结构，而满秩矩阵也有特殊的加速求解方法，大规模分布式计算对矩阵的分块和通信有较高要求。一些特殊线性方程组求解方法比如多重网格，Krylov子空间，GMRES，JFNK等涉及到多种方法组合使用，基本都可以作为一个大的研究方向，真正解决实际问题需要相当的实践经验。

线性代数和矩阵其实在内容上有所重叠，从实际研发角度看，线性代数是基础，矩阵论着重于对矩阵的操作运算，比如矩阵求逆，分解，迭代计算，也包括各种类型线性方程组的求解。通常研发中

不会写底层的求解库，而是去调用第三方库，但是每种库都有其特点，理解矩阵的特征对于选择合适的求解库也非常重要。

参考[一篇文章入门大规模线性方程组求解](#)

经典的《矩阵计算》一书基本涵盖了矩阵方方面面，其中对[大规模线性方程组](#)各种解法介绍也比较全面，求解器开发必备参考书。



最近几年火热的人工智能，计算机视觉，深度学习等，其底层算法实现也都是以线性代数和矩阵论为基础。

以上列举了一些求解器开发的数学基础内容，实际研发中还需要对各种通用基础算法比较了解，比如常规的排序算法，优化算法，线性规划等，有些求解器可能是半数值半解析，需要进行数学公式推导等等。

总之，求解器开发对数学知识要求相对较高，还要了解行业内业务和常用模型。要开发出高水平的求解器，掌握必要的软件架构设计，高性能计算，软硬件知识也必不可少。

阅读: null

在看: null